

# スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算機に関する理論的研究

若浦 光  
2017年 2月

筑波大学大学院博士課程  
数理物質科学研究科博士論文  
博士(工学)

スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子計算機に  
関する理論的研究

若浦 光  
物性・分子工学専攻



# 目次

§ 1	序論	4
1.1	銅酸化物高温超伝導体	5
1.2	スピン渦誘起ループ電流	7
1.3	スピン渦誘起ループ電流の存在を裏付ける実験事実とその解釈	8
1.3.1	スモールポーラロン	8
1.3.2	砂時計型磁気励起スペクトル	8
1.3.3	負のホール係数	9
1.3.4	極 Kerr 効果	10
1.3.5	$z$ 軸方向のスピンに由来しない磁気モーメント	10
1.4	量子コンピューター	12
§ 2	波動関数の一価性	14
2.1	モデルハミルトニアン	14
2.1.1	Tight-binding 近似	14
2.1.2	スピンが捻れた基底	19
§ 3	Car-Parrinello の方法によるスピン渦の導出	23
3.1	スピンハミルトニアンによる $\xi$ の最適化	23
§ 4	一価波動関数の導出	27
4.0.1	$\Delta\chi_{\mu 0}$ の導出	31
4.0.2	$\delta\Delta\chi_{\mu}$ の導出	31
§ 5	スピン渦誘起ループ電流の直交状態	34
§ 6	量子計算とそのシミュレーション	41
§ 7	Grover の検索アルゴリズムのシミュレーション	45
§ 8	量子ビット結合エネルギー	50
§ 9	外部電流を量子ビットカップラーとして使用する	55
9.1	観測の方法	63
§ 10	4 量子ビット系	66

---

§ 11	結論	69
§ 12	謝辭	74

## 要旨

スピン渦誘起ループ電流が量子ビットとして利用可能かつ、それを量子ビットとして用いることで実用量子コンピューターが構築可能であることを理論的に示した。スピン渦誘起ループ電流は銅酸化物高温超伝導体において  $\text{CuO}_2$  平面に存在するナノサイズのループ電流である。極低温環境下では、バルクに存在するホールはその移動度をほぼ失いスモールポーラロンとなる。ただし、表面付近のホールはその限りでない。このホールを挟んだホッピングに対する超交換相互作用とスピン間の交換相互作用によってスピン渦が形成され、それがスピン渦誘起ループ電流を誘起する。この電流には右回り、左回りの自由度があるため、量子ビットとして利用可能である [1]。この研究の目的は、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして、量子コンピューターを実現することである。この電流は、超伝導量子ビットの演算速度 [2] と、イオン・トラップの小ささ [3] を併せ持つ実用量子ビットとして利用可能であると期待される。この電流は大きな電氣的遷移双極子モーメントを有するため、遷移双極子相互作用によって任意の電流パターンの重ね合わせが実現できる。これを用いて、量子ビットが結合している系においては量子計算が高速で実行可能であることが確認されている [1]。更に、 $C_2$  対称性を有さない電流パターンであればどのようなものでも量子ビットとして利用できる。単一量子ビットに相当する電流を独立させることは可能かつ、更にその間に外部電流を流しこむことでそれらの間の結合も制御できることが確認された。加えて、電流自体が発する磁場を測定することにより、電流パターンを識別できることも確認された。これにより、この電流は DiVincenzo の 5 条件 [4] のうち、1,2,3,5, 全てを満たすことが明らかになった。この電流はトポロジカルなパラメーターである  $\chi$  の巻き数によって定められているため、外乱に対しても頑強であると思われる。そのため 4, も満たすと期待される。従って、この電流は将来実用的な量子コンピューターが実現する際、その量子ビットとして利用される最有力候補になりうるということが明らかになった。

## § 1 序論

この研究は、スピン渦誘起ループ電流が量子ビットとして利用することができ、そうすることで量子コンピューターのサイズを従来の超伝導量子ビットと比較して 5 桁分は小型化可能であることを示すものである。今日、量子コンピューターの物理的実現に向けて様々な量子ビットが研究されている。主に、イオン・トラップ [3]、Nuclear-Magnetic-Resonance(NMR)[3]、キャビティ QED、光格子トラップ等の粒子に量子情報を保存するタイプと、超伝導回路量子ビット [5]、量子ドット等の回路に量子情報を保存するタイプの 2 種類である。しかし、DiVincenzo が提案した実用量子ビットの 5 条件、1) 初期化、2) 観測、3) ゲート演算、4) 長寿命、5) 集積化可能性のうち、最後の集積化はすべての量子ビットにとって関門となっている [4]。実際、上記のどの量子ビットであっても単一の系に 100 量子ビットを実装することは不可能であると言われている。そのため、現在、数量子ビットを実装したモジュールを複数結合させてそれを実現する試みが盛んだが、特定のモジュール間に結合を起こす装置かモジュールそのものをかなり大きくしなければならぬトレードオフに悩まされている。我々は、スピン渦誘起ループ電流に基づく新たな超伝導理論を提唱している。この電流は銅酸化物高温超伝導体の  $\text{CuO}_2$  平面上に流れるナノサイズのループ電流である。 $\text{CuO}_2$  平面上の銅原子の荷電子が有するスピンの間には交換相互作用が働き、またホールを挟む荷電子の間には超交換相互作用が働く。これによってスピン渦が形成され、波動関数の一価性からスピン渦誘起ループ電流の存在が導かれる。この電流の方向は、 $\chi$  の巻き数によって定められており、右回り、左回りの自由度を有する。そのため、単一あるいは複数のホールの周りに流れる電流の方向の組み合わせを量子ビットの 0 と 1 に見立てて利用することができる。スピン渦誘起ループ電流なら DiVincenzo の 5 条件すべてをクリアし、モジュール型であっても、実用量子コンピューターを実現できると期待される。その理由は

1. 初期化は単に系を冷却することで実現する。この時、エネルギー準位が最も低い電流状態が実現する。
2. 観測は系に 2 端子から外部電流を流し、別の 2 端子から出てくる電流を計測することで実現する。また、単一量子ビットに相当する電流が独立であればそれらが発する磁場を計測することによっても実現する。
3. 演算はレーザーと電流が持つ電氣的遷移双極子モーメントを相互作用させることで実現する。
4. この電流の状態はトポロジカルな巻き数によって決められるので、外乱に対しては頑強であると期待される。また、量子誤り訂正もナノ秒単位で実現可能と思われる [6]。
5. 単一量子ビットに相当する電流は約  $5.76\text{nm}^2$  に収まる。また、カップラーも外部から電流を流しこむことで実現するためナノスケールに収まる。したがって 100 量子ビットの系であっても数平方マイクロメートルの範囲に収まる。

本論では、主に 3,5, を論ずる。1, については Metropolis 法を用いたシミュレーション結果が既にある [7]。2, は 9.1 節で説明する。4, は数値シミュレーションは未だ行っていない。実験で観測されなければ定量的な議論は難しいからである。本論の構成はまず § 2 章で波動関数の一価性とその必要性について論じる。

§ 3 章では Car-Parrinello 法によるスピン渦の導出方法について解説する。§ 4 章ではスピン渦誘起ループ電流が存在する系の波動関数の求め方を詳述する。§ 5 章では簡単な系における波動関数の直交状態を取り上げ、その計算方法を論じる。§ 8 章では単一量子ビットに相当する電流パターン 2 つの間の結合の強さについて論じる。§ 9 章では外部電流を用いて単一量子ビットに相当する電流間の結合を制御する方法とその結果について論じる。§ 10 章では独立な 4 つの量子ビットに相当する電流が存在する系におけるエネルギー準位、遷移双極子モーメントを論じる。§ 11 は本論の結論である。

## 1.1 銅酸化物高温超伝導体

1986 年、J. G. Bednorz と K. A. Müller によって銅酸化物高温超伝導体が初めて合成された。超伝導体となる転移温度は、最初に合成された物質で 35K 程度、今では液体窒素温度 77K を超える物質も発見されている。この転移温度は BCS 理論で予言される常圧環境下における<sup>\*1</sup>上限である 30K をはるかに上回るものである。そのため、BCS 理論を内包した上で高温超伝導を説明する新理論を構築する動きが一時期盛んに行われていた。しかし、発見から 30 年以上たった今日でも様々な理論が提唱されているが、どれもコンセンサスは得られていない。

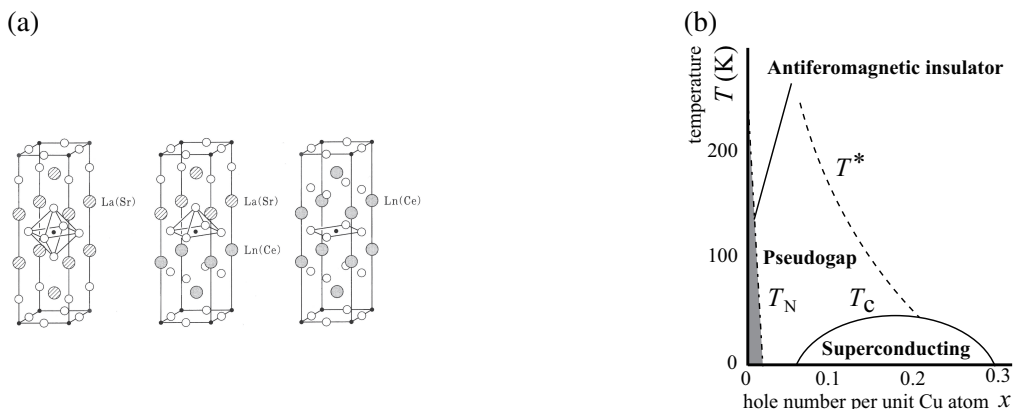


Fig. 1 (a) 代表的な銅酸化物高温超伝導体の結晶構造 [9]。○ は  $O^{2-}$ 、● は  $Cu^{2+}$  をそれぞれ表す。(b) 銅酸化物高温超伝導体の相図の概念図。

銅酸化物高温超伝導体の結晶構造の特徴はどの銅酸化物高温超伝導体も共通して  $CuO_2$  の 2 次元平面をもつことである。この  $CuO_2$  平面で超伝導が起こると考えられている。銅酸化物高温超伝導体の母物質は Mott 絶縁体となっている。Mott 絶縁体とは電子間に働く強い Coulomb 斥力により電子が容易に動けなくなって生じる絶縁体である。このメカニズムは Band 絶縁体とは異なる<sup>\*2</sup>。この母物質に適切な量のホールをドーピングして温度を下げると、系は異常金属的性質を示す常伝導相から超伝導相へと行き着く。ドーピング濃

<sup>\*1</sup>  $H_2S$  で 200GPa の圧力をかけることで臨界温度 216K の超伝導体になることが最近報告された [8]。

<sup>\*2</sup> EXAFS における実験から、 $CuO_2$  平面内における銅原子と酸素原子の結合長が変化していることが、また、結晶場が分裂することが確認されている。これにより五重に縮退していた 3d 軌道の縮退が解け、 $3d_{x^2-y^2}$  軌道が最高準位 (HOMO) となる。各銅原子につきこの軌道を電子がひとつだけ占有する。



度がある一定の範囲のとき、常伝導相と超伝導相の間に異常金属相の擬ギャップ相が存在している。この擬ギャップ相も銅酸化物高温超伝導体の大きな特徴のひとつである。超伝導体には2つの大きな性質がある。完全導電性とマイスナー効果である。完全導電性とは電圧降下なしに直流電流が流れるというものである。マイスナー効果とは超伝導体内部の磁場を外部に押し出す効果である。超伝導体状態に外部磁場をかけても内部に磁場が侵入しないことは電気抵抗が0でも説明できる。しかし、外部磁場をかけた状態で超伝導相に転移させた場合においても磁場は内部から押し出される。この性質は電気抵抗が0では説明がつかない。そのため、永久電流が流れている状態が熱力学的な準平衡状態になっていると考える必要がある。BCS理論では銅酸化物高温超伝導体の高い転移温度と擬ギャップ相を説明できなかった。そこで我々はBCS理論に代わる超伝導体の理論としてスピン渦誘起ループ電流理論 [10] を提唱している。

## 1.2 スピン渦誘起ループ電流

スピン渦誘起ループ電流に基づく新たな超伝導理論が提唱されている。多体波動関数は近似を用いなければ解くことはできない。一般的にこれを解くための近似法として、ハートリー・フォック平均場近似が知られている。これは、一電子に着目し、これは外場と格子、他の電子が作る平均場の中を移動するとして波動関数をそれぞれの電子について解き、その一電子波動関数を元にスレーター行列式を作る。これを系の多体波動関数とするものである。遍歴電子がスピン渦を作る場合、スピン渦と電子の相互作用が現れる影響で、ハートリー・フォック平均場近似を用いて一電子波動関数を求めるとそれは座標に対して多価になる。本来、波動関数を厳密に求めたならその解は全ての座標に対して一価有限になるはずである。このような場合、求めた多価の波動関数は基底状態として適当ではない、何かしらの方法で一価にしなければならない。トポロジカル絶縁体においてディラック・コーンが導かれる際、波数に対して多価の波動関数が求められるため、一価にする方法がいくつか考えられている [11]。スピン渦誘起ループ電流の場合も、波動関数を一価に保つ必要がある。この電流が存在する系の 1 つとして考えられる高温超伝導体における  $\text{CuO}_2$  平面を例に解説していく。Fig. 2 は、銅酸化物高温超伝導体の  $\text{CuO}_2$  平面における銅原子の  $3d_{x^2-y^2}$  軌道に属する電子の様子である。Fig. 2(中央) は電子のスピンを表す。スピンは Rashba スピン軌道相互作用によって面に寝ているので  $S = (\cos \xi, \sin \xi, 0)$  で表される。ハートリー・フォック近似を用いて求めた多価の波動関数に位相項を掛け、

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \exp(-i \sum_i^N \frac{\chi(\mathbf{r}_i)}{2}) \quad (1.1)$$

とする。ここで、 $\chi$  の位相は、Peierls の位相と同じ形をしている。Peierls の位相因子とは、電子系内部におけるベクトルポテンシャル  $A^{em}$  の変化が緩やかな場合、ベクトルポテンシャルの影響は波動関数全体の位相の形で導入される。つまり、これは、ベクトルポテンシャルに対するゲージ変換を表す。すなわち、位相  $\chi$  はゲージ変換

$$A^{em} \rightarrow A^{em} + \frac{\hbar}{2q} \nabla \chi \quad (1.2)$$

をかけることに相当する。つまり、この位相  $\chi$  は仮想的なベクトルポテンシャルの役割を果たす。すなわち、この位相は系に閉じた電流を流す。これがスピン渦誘起ループ電流である。この電流は系に対して一通りではない。この電流は、 $\xi$  と  $\chi$  の巻き数  $w_{C_l}[\nabla \xi]$ 、 $w_{C_l}[\nabla \chi]$  に対する系の束縛条件

$$w_{C_l}[\nabla \chi] + w_{C_l}[\nabla \xi] = \text{even} \quad (1.3)$$

を満たすものならばどのような電流でも流れる<sup>\*3</sup>。 $\xi$  の巻き数は変えられないが、 $\chi$  の巻き数は変えられる。そのため、 $\chi$  の巻き数が異なる状態を量子ビットの状態として量子計算が可能である。例えば、Fig.

<sup>\*3</sup> 巻き数とは、ある閉ループ  $C_l$  に対して、位相パラメータの値をの変化を積分したもの。例えば、位相  $\theta$  のループ  $C_l$  に沿った積分は  $w_{C_l}[\nabla \theta] = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_l} \nabla \theta \cdot d\mathbf{r}$  となる。

2(左) は (中央) のスピン渦が 4 つ存在する系の周りに流れるスピン渦誘起ループ電流である。この電流はそれぞれのホールに対して  $w_{C_l}[\nabla\chi] = 1$ 、 $w_{C_l}[\nabla\chi] = -1$  がそれぞれ電流の左回り、右回りに対応するので全部で 16 通りの電流が流れる。

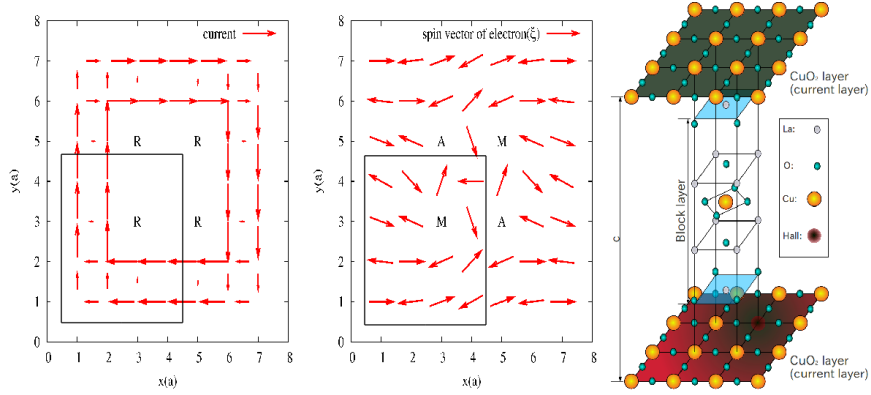


Fig. 2 銅酸化物高温超伝導体におけるスピン渦誘起ループ電流の模式図。(左)(中央)の系における電流の図。 $L$ 、 $R$ はそれぞれ  $w_{C_l}[\nabla\chi] = 1$ 、 $w_{C_l}[\nabla\chi] = -1$  であることを表す。(中央)Spin-Vortex-Quartet(SVQ)系におけるスピン構造。赤い矢印はスピンの面内角を表す。 $M$ 、 $A$ はそれぞれ  $w_{C_l}[\nabla\xi] = 1$ 、 $w_{C_l}[\nabla\xi] = 1$ 、 $w_{C_l}[\nabla\xi] = -1$  を表す。(右)YBCO 高温超伝導体の (中央)の図における四角の部分を取り切った  $z$  軸方向の結晶構造。

### 1.3 スピン渦誘起ループ電流の存在を裏付ける実験事実とその解釈

銅酸化物高温超伝導体における電気伝導は、ホールがになっていると考えられている。しかしながら、低温においては、それを反証するいくつかの実験事実が存在する。

#### 1.3.1 スモールポーラロン

低温において、高温超伝導体における  $\text{CuO}_2$  面の銅原子と酸素原子の結合長は変化することが、EXAFS と ARPES の実験から明らかになった。Jahn-Teller 効果による結晶場の分裂が起こるのである [12]。この時、ホールはスモールポーラロンとなり格子に束縛される。そのため、低温でホールが電気伝導を担うことはない。

#### 1.3.2 砂時計型磁気励起スペクトル

銅酸化物高温超伝導体における中性子散乱の実験結果に、反強磁性秩序下におけるホールの伝導では説明できない現象が報告されている。銅酸化物高温超伝導体において、ホールのドーブ率が  $1/8$  では超伝導相が出現しなくなり、砂時計型の磁気励起スペクトルが現れる。しかしながら、反強磁性秩序を前提とした理論計算では、放物線状の下に凸なスペクトルが導かれる。マルチバンドによる計算でもこのスペクトルは計算可能だが、スピン渦誘起ループ電流の存在を前提としたスピンハミルトニアンによる計算でも導

くことができる (Fig. 3)[13]。この結果から、スペクトルの下半分は、スピン渦誘起ループ電流によって生じるものであると解釈できる。

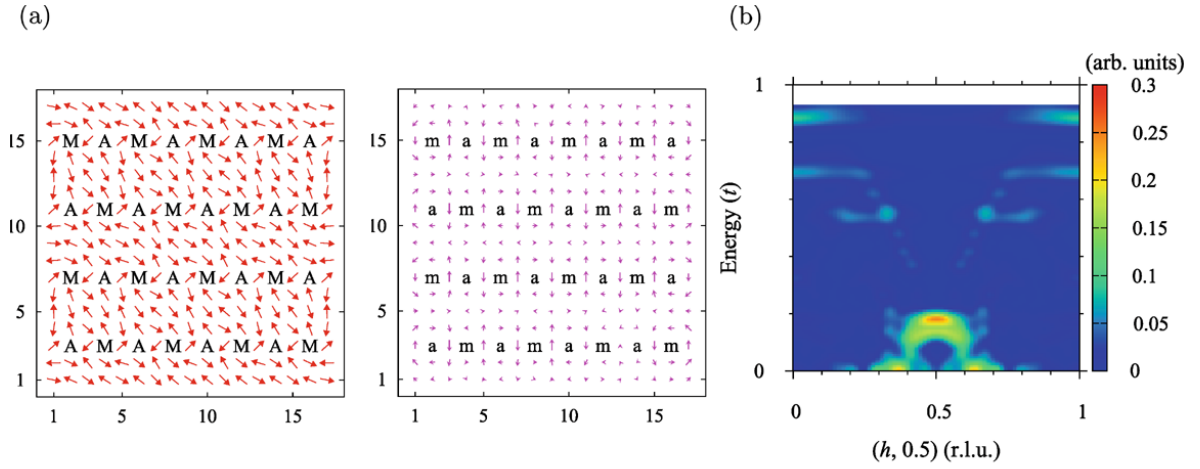


Fig. 3 スピン渦誘起ループ電流理論に基づく砂時計型磁気励起スペクトル。(左) スピン構造。(中央)(左) の系の周りに流れる電流。 $m$ 、 $a$  は  $\chi$  の巻き数がそれぞれ 1、 $-1$  であることを表す。(右)(左) の系の周りに流れる電流とスピン渦が作る砂時計型磁気励起スペクトル。横軸は波数、縦軸はエネルギー、色はスペクトル強度を表す [13]。

### 1.3.3 負のホール係数

銅酸化物高温超伝導体におけるホール係数を測定する実験結果に、興味深いデータが存在する [14]。これは、銅酸化物高温超伝導体における電気伝導を考える上で重要なファクターである。この実験は、YBCO 系銅酸化物高温超伝導体を 1.5-150(K) までの様々な温度において、磁場とホール係数の関係を調べるものだ。その結果、ホール係数は、 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$  で 1.5-15K において、負になった。また、1.5-7.5K におけるデータには、ホール係数の振幅が見られる。これは、電子の回転周期が変化したためであると考えられる。そのため、約 15K を境に超伝導電流のキャリアが変わり、低温では電子が、高温ではホールが担うことを示唆している。このことから、超伝導相において低温では電子が磁場を中に入れないようなループ電流を形成すると考えられる。また、このループ電流は超伝導が破壊されても  $\chi$  の巻き数が変わった状態で生き残ると推測される。

#### 1.3.4 極 Kerr 効果

磁気光学効果のひとつである極 Kerr 効果を使った、YBCO の残留磁化に関する興味深いふたつの実験結果がある [15]。

ひとつめの実験 (A) は以下のように行われた。

1. 常温で  $H = +4$  T の磁場を印加し、その磁場を印加したまま試料を 4.2 K まで冷却する（磁場中冷却）。
2. 4.2 K に達したら磁場を切り、ゼロ磁場下で温度を上昇させる。この過程で Kerr 回転角  $\theta_K$  を測定する。 $\theta_K$  は試料が磁化されていると有限値となる。

銅酸化物高温超伝導体は第二種超伝導体であるから  $T_C$  以下での大きな  $\theta_K$  は Abrikosov 渦によるものと考えられる。しかし Abrikosov 渦が存在できない  $T_C$  以上の温度領域においても試料は磁化されたままである。

ふたつめの実験 (B) の手順は次のようである。

1. 常温で  $H = \pm 4$  T の磁場を印加し、一旦その磁場を切る（磁場  $H$  でなます）。
2.  $h = \pm 60$  Oe の弱い磁場を印加し、その弱い磁場を印加したまま試料を 4.2 K まで冷却する（磁場中冷却）。
3. 4.2 K に達したら弱い磁場を切り、ゼロ磁場下で温度を上昇させる。この過程で  $\theta_K$  を測定する。

$H$  と  $h$  の符号を変えると 4 つのパターンがある。 $\theta_K$  は  $H$  の符号に依存している。しかし  $T_C$  以下での  $\theta_K$  は  $h$  の符号の影響を受ける一方で  $T_C$  以上での  $\theta_K$  はそれをほとんど受けていない。したがって  $T_C$  以上の温度領域での  $\theta_K$  は磁場  $H$  によるなましで決まっているものと考えられる。これは実験 (A) での  $T_C$  以上の温度領域の  $\theta_K$  と、実験 (B) で  $H = +4$  T とした条件下でのそれとがほとんど一致していることから明らかである。

実験 (A)(B) の結果はスピン渦誘起ループ電流を使うと次のように説明できる。常温で磁場  $H$  を印加するとスピン渦誘起ループ電流の向きを決定づけるトポロジカルな量である巻き数が確定する。高温においてはスモールポーラロンが十分に形成されず、またその局在性が低いことからスピン渦誘起ループ電流による磁化は弱い。一方、低温においてはスモールポーラロンの数とその局在性の増加に伴って、スピン渦誘起ループ電流が安定して生じるようになる。その結果試料は比較的強く磁化される。ここで巻き数はスモールポーラロンが完全に形成されていなくても保存されると仮定した。逆にいうと、実験 (A)(B) で観測された  $T_C$  以上の温度領域での磁化がスピン渦誘起ループ電流に起因するものであればその巻き数はスモールポーラロンが破壊されても記憶されているということになる。

#### 1.3.5 $z$ 軸方向のスピンに由来しない磁気モーメント

少し前の論文になるが、スピンに由来しない特異な磁気モーメントが観測されたことを報告する記事が Nature Communication から発表された [16]。この記事によれば、中性子線散乱実験の結果、 $z$  軸方向の磁

気モーメントは大体擬ギャップ相転移温度である 200K あたりから低温になるほどに増加することが明らかになった。 $\text{CuO}_2$  平面内成分のものが低温になるに従って増加するので、 $z$  軸方向成分は減少するはずである。これは、超伝導相においては消える C.Varma のループ電流 [17] では説明がつかない。これは、スピン渦誘起ループ電流が低温においてキャリアになるからであると考えられる。また、擬ギャップ相転移温度からスピン渦誘起ループ電流の形成が始まることを裏付けるデータでもある。更に、Metropolis 法による最適ドーピングを施した YBCO 超伝導体の  $\text{CuO}_2$  平面におけるスピン渦誘起ループ電流生成の計算機上シミュレーションの結果でも、 $\chi$  の巻き数は擬ギャップ相転移温度以下では安定であるとの結果が出た [7]。また、スピンが低温になるほど面内に寝るのは、Rashba スピン軌道相互作用によるものである。これは、他の理論的予測によっても示されている [18]。

## 1.4 量子コンピューター

量子コンピューターは、量子力学的重ね合わせを利用して演算を行うコンピューターである。その最小情報単位である量子ビットは 0 と 1 に相当する状態の重ねあわせ状態にすることが可能である。これを用いて、量子コンピューターは従来のコンピューターが苦手とする様々な問題をそれより圧倒的に早く計算することが可能である。例えば、高速フーリエ変換アルゴリズムは現在最も速いフーリエ変換アルゴリズムであるが、それでも変換するサンプルの数  $n$  に対して  $O(n2^n)$  回の演算を必要とする。しかし、量子フーリエ変換であれば  $O(n^2)$  回の演算で済む [19]。他にも、素因数分解を圧倒的に速く計算する Shor のアルゴリズムも有名である。単一量子ビットの状態は、2 次元ベクトルで表される。量子ビットが 0 と 1 の重ね合わせで表されるためである。その模式図が、下に示すブロッホ球である (Fig. 4)。そして、量子ビットにおける演算は全て、ユニタリー変換で表される。特に、単一量子ビットに対するそれは  $2 \times 2$  行列で表される。このゲート演算は、ブロッホ球における回転演算子

$$R(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

と位相の積で表される。多数量子ビットが存在する系において、その状態は単一量子ビットの状態の直積で表されるため、 $n$  量子ビット系に対して状態は  $2^n$  次元ベクトルになる。また、単一ビットゲートはそれぞれの量子ビットに個別に、2 ビットゲートは特定の 2 量子ビットに働く。例えば、 $|1\rangle_1 |0\rangle_2$  の状態にある 2 量子ビット系において、2 つの量子ビットに同時に Walsh-Hadamard ゲートを掛けた場合、

$$H |1\rangle_1 H |0\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1 - |1\rangle_1) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_2 + |1\rangle_2) \quad (1.5)$$

となり、制御 NOT ゲート  $CX$  を、第一量子ビットを制御ビットとして掛けた場合、このゲートは制御ビットが 1 の場合のみ標的ビットを反転させるため、

$$CX |1\rangle_1 |0\rangle_2 = |1\rangle_1 |1\rangle_2 \quad (1.6)$$

となる。

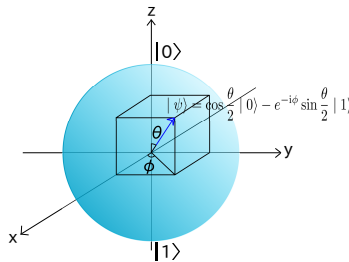


Fig. 4 ブロッホ球の模式図。単一量子ビットの重ね合わせ状態は球面上の点で表される。

これが実用化されれば社会に大きな変革をもたらす、しかしながら、そのためには集積化の問題をクリアしなければならない。量子コンピューターの最小情報単位は量子ビットであるが、実用化のためには DiVincenzo が提案した以下の 5 条件をクリアしなければならない

1. すべての量子ビットは、ある特定の状態に初期化できる。
2. すべての量子ビットは、観測できる。
3. 単一量子ゲートと制御 NOT 演算が実行できる。
4. ゲート演算にかかる時間はデコヒーレンス時間に対して十分短い。
5. 量子ビットが系にいくつ存在しても、それらすべてが独立かつそれらの間の結合が制御できる。またそのような系を実現できる。

1-4, は既の実現している量子ビットがいくつか報告されている。NMR、超伝導量子ビットの一種である Xmon などがそうである。しかし、5, の集積化はすべての量子ビットにとって関門となっている。量子ビットには主に 2 種類に分けられる。1 つはイオントラップ、NMR 等、粒子が量子情報を担う粒子型量子ビット、もう一方が超伝導量子ビットなどの回路上に量子ビットを配置する回路型量子ビットである。

それぞれの量子ビットが持つビットの準位差等各種のパラメーターを変えることができる点、集積化が前者に比べて容易である点で後者のほうがより実用的である。しかし、量子ビットとその間のカップラーが大きくなりすぎる欠点を抱えている。カップラーとは、独立な量子ビット間の結合をエネルギー的に操作する装置である。イオン・トラップの場合はイオンからなる人工格子の振動モード、超伝導量子ビットの場合は共振回路など、量子ビットの種類によって様々である。Di-Veocenzo の 5 条件のうち 5, 以外は多くの量子ビットが満たしているが、どの量子ビットも長所と短所を有している。なので、集積化を目指して新たな量子ビットが研究されてきているが、結局のところイオン・トラップの 14 量子ビット系が実験で実現された最も多くの量子ビットを有する系である (Table. 1)。スピン渦誘起ループ電流は、トポロジカル量子ビットではないが、トポロジカルなパラメーターによって定められた量子ビットである。従って、それに匹敵するほどの外乱に対する頑強性と、超伝導量子ビットの計算速度を併せ持つ量子ビットになると思われる。更に、理論計算の結果から、集積化も可能であると確認された。それについては § 11 章で説明する。更に、この量子ビットを実験的に実現するのに必要不可欠な、 $\text{CuO}_2$  平面一層におけるホール濃度と位置を制御する技術は分子線エピタキシーを用いるものであれば既に報告されている [20]。

単一のモジュールに 100 量子ビットを集積することから多くの研究グループが手を引いた。最近は少数量子ビットを有するモジュールを複数用意し、それらの持つビットのうちいくつかを他のモジュールのビットと結合させて計算を行う手法が盛んに研究されている。この方法はモジュール量子計算と呼ばれ、様々な量子ビット系において、従来の単一モジュールを用いる計算より正確に計算できるなど集積化以外の優位性も報告されている。しかし、回路型量子ビットでは単一のモジュールが大きくなりすぎて、仮に実用的な量子コンピューターがそれで実現したとしても、それはテニスコート一面に収まらない程度のサイズになると予想される。対して、イオントラップの単一モジュールを数平方ミクロンメートル程度のサイズに収め、それらを小型光回路でエンタングルドさせるシステムが報告されている [25]。近年、量子ビットは量子コンピューターのみならず、量子アニーリングと呼ばれる新たな量子アニーリングの一手法に使わ



Table. 1 量子ビットの性能表。一番上の行は 5 条件のうちどれに当たるかを表す。 は容易に実現することを、 は実現することを、 は困難ではあるが現実の系で実現できることを表す。また、<sup>(t)</sup> は理論的に予言された値であることを表す。

	1,	2,	3,5,	5,	4,5,	4,5,
	初期化	観測	演算時間 (s)	最大量子ビット数	量子性持続 (s)	演算忠実度 (%)
NMR[2][21]			$10^{-3}$	7	$10^4$	99.9
イオン・トラップ [3]			$10^{-12} - 10^{-6}$	14	1000	99.9
NV 中心 [22]			$10^{-6}$	6	10	99.2
量子ドット [2][23]			$10^{-9}$	2	0.03	99.0
超伝導量子ビット [5][2]			$10^{-12} - 10^{-6}$	9[5]	$5.0 \times 10^{-5}$	99.4
マヨラナ粒子 [24]	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A
スピン渦誘起ループ電流	<sup>(t)</sup>	<sup>(t)</sup>	$10^{-9(t)}$	$\geq 4^{(t)}$	N/A	N/A

れるようになった [26][27]。D-Wave が 2013 年に 512 量子ビットを有する量子アニーリングマシンを開発して話題になって以来、量子コンピューターの動作原理を模倣するデバイスの開発はいくつかのグループで盛んに行われている [28][29]。しかしながら、それらは組合せ最適化問題とそれに近似できる問題にしか応用することはできない。量子ビットの研究は、すべて量子コンピューターと量子アニーリングマシンの実現を目指すものである。

## § 2 波動関数の一価性

この章では、スピン渦誘起ループ電流を導出するために必要なパラメーターとその導出法を解説する。また、波動関数の一価性がどのようにしてこの系に導入されるのか詳しく説明する。2.1 節でハミルトニアンを導出し、一般的な角度を向いたスピンの表式を導入する。

### 2.1 モデルハミルトニアン

#### 2.1.1 Tight-binding 近似

電子場のハミルトニアン銅酸化物高温超伝導体の  $\text{CuO}_2$  平面は電子系である。そのため、以下で導入するのは電子系のハミルトニアンである。電子は空間座標  $\mathbf{r}$  とスピン  $s$  の自由度を持つので、まず、位置  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$  とスピン  $s = \pm \frac{1}{2}$  の直積で表される電子軌道  $x$  を考え、その基底を

$$|x\rangle = |\mathbf{r}\rangle \otimes |s\rangle \quad (2.1)$$

とする。このような基底を生成、消滅させる演算子は場の演算子と呼ばれる。 $\hat{\psi}^\dagger(x) (= \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}; s))$  及び

$\hat{\psi}(x)(= \hat{\psi}(r; s))$  をそれぞれ場の生成、消滅演算子とすると真空状態  $|vac\rangle$  に対する作用は

$$\langle vac | \hat{\psi}(x) = \langle x | \quad \hat{\psi}^\dagger(x) | vac \rangle = | x \rangle \quad (2.2)$$

である。ここで、2つの演算子  $\hat{A}$ 、 $\hat{B}$  からなる演算子  $[\hat{A}, \hat{B}]_+$  を  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  の反交換子と呼び、

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} (= [\hat{B}, \hat{A}]_+) \quad (2.3)$$

と書く。反交換子に規定される  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  の関係を反交換関係という。電子はフェルミ粒子なので電子場の演算子は次の反交換関係を満たす。

$$[\hat{\psi}(r; s), \hat{\psi}^\dagger(r'; s')]_+ = \delta(r - r')\delta_{ss'}, [\hat{\psi}(r; s), \hat{\psi}(r'; s')]_+ = [\hat{\psi}^\dagger(r; s), \hat{\psi}^\dagger(r'; s')]_+ = 0 \quad (2.4)$$

続いて、本題であるハミルトニアンの構成に入る。先ほど導入した電子場の演算子を使ってハミルトニアン  $\hat{H}$  を次のように設定する [30][31]。

$$\hat{H} = \int dx \hat{\psi}^\dagger(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(r) \right) \hat{\psi}(x) + \frac{1}{2} \int dx \int dx' U(|r - r'|) \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x) \quad (2.5)$$

ここで、軌道に関する積分  $\int dx$  は

$$\int dx = \sum_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3r \quad (2.6)$$

また、 $m_e$  は電子の質量、 $V(r)$  は  $r$  の位置にいる電子が受ける原子核によって作られるクーロンポテンシャル、 $U(|r - r'|)$  は  $r$  の位置にいる電子と  $r'$  の位置にいる電子が作るクーロンポテンシャルである。したがってハミルトニアン eq. (2.5) の第1項は電子の運動エネルギー、第2項は電子-原子核間に働くクーロン相互作用、第3項は電子-電子間に働くクーロン相互作用を表している。

### スピン軌道関数

位置  $j$  にスピン  $\sigma$  を持った電子を一つだけ生成、消滅させる演算子をそれぞれ  $c_{j\sigma}^\dagger$ 、 $\hat{c}_{j\sigma}$  とする。そのような電子の状態を

$$|j\sigma\rangle = |j\rangle \otimes |\sigma\rangle \quad (2.7)$$

で表すことにする。このとき  $|j\sigma\rangle$  と  $c_{j\sigma}^\dagger$ 、 $\hat{c}_{j\sigma}$  との関係は

$$\langle vac | \hat{c}_{j\sigma} = \langle j\sigma|, \quad c_{j\sigma}^\dagger | vac \rangle = |j\sigma\rangle \quad (2.8)$$

である。ふたつの演算子  $c_{j\sigma}^\dagger$ 、 $\hat{c}_{j\sigma}$  によって場の演算子がサイト数  $N$  に対してスピン自由度の数  $2 \times$  サイト数次元の基底

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^N \psi_{j\sigma}(\mathbf{x}) \hat{c}_{j\sigma}, \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^N \psi_{j\sigma}^*(\mathbf{x}) c_{j\sigma}^\dagger \quad (2.9)$$

の形に展開できると仮定する。展開係数として現れた波動関数  $\psi_{j\sigma}(\mathbf{x}) (= \langle \mathbf{x} | j\sigma \rangle)$  をスピン軌道関数と呼んでいる。これは次に述べる軌道関数  $\varphi_j(\mathbf{r}) (= \langle \mathbf{r} | j \rangle)$  とスピン関数  $\sigma(s) (= \langle s | \sigma \rangle)$  の積で表される。

$$\psi_{j\sigma}(\mathbf{x}) = \psi_{j\sigma}(\mathbf{r}; s) = \varphi_j(\mathbf{r}) \sigma(s) \quad (\sigma = \uparrow \text{ のとき } \sigma(s) = \alpha(s), \sigma = \downarrow \text{ のとき } \sigma(s) = \beta(s)) \quad (2.10)$$

$\varphi_j(\mathbf{r})$  は  $\psi_j(\mathbf{x})$  の空間部分を表している。一方、 $\sigma(s)$  は  $\psi_j(\mathbf{x})$  のスピン部分を表している。スピン関数はスピン座標  $s$  に対して次のような値をとる。

$$\alpha\left(\frac{1}{2}\right) = 1, \quad \alpha\left(-\frac{1}{2}\right) = 0, \quad \beta\left(\frac{1}{2}\right) = 0, \quad \beta\left(-\frac{1}{2}\right) = 1 \quad (2.11)$$

また、スピン関数は次の規格直交性を満たす。

$$\sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sigma^*(s) \sigma'(s) = \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.12)$$

さて、先ほど eq. (2.9) を仮定すると述べたが、その理由は一般に  $\{|j\sigma\rangle\}$  は離散基底、 $\{|\mathbf{r}s\rangle\}$  は連続基底であるため、 $\{|j\sigma\rangle\}$  は  $\{|\mathbf{r}s\rangle\}$  が張る Hilbert 空間の完全系を成していないからである。有限値で打ち切らずに  $N \rightarrow \infty$  とすれば完全系となるが、そのようなことは実際不可能である。そのため eq. (2.9) は近似にすぎない。

### Tight-Binding 近似

$\hat{c}_{j\sigma}$ 、 $c_{j\sigma}^\dagger$  を原子軌道  $j$  にスピン  $\sigma$  をもつ電子を生成、消滅させる演算子として扱った場合を考える。このとき波動関数の空間部分である軌道関数  $\varphi_j(\mathbf{r})$  は原子軌道関数を表すことになる。したがって eq. (2.9) は任意の波動関数を原子軌道関数の線形結合で近似するという意味をもつことになる。原子軌道関数は原子核付近に局在しているから、このような近似を Tight-Binding 近似<sup>\*4</sup>という。Tight-Binding 近似では電子は原子核の位置周辺に局在している。そのため原子核の位置のことを、電子が収容されるサイトという意味で サイト といういい方とすることがある。本論文でもそのようないい回しをすることにする。一般にひとつの原子は複数の原子軌道をもつ。そのためいまのように、 $j$  を原子位置ではなく原子軌道を指定する添字とした場合、 $j$  はその原子軌道をもつ原子核位置とは一対一に対応していない。しかし、各原子が原子軌道をひとつしかもたないとき、あるいはそのように各原子がもつひとつの原子軌道にのみ注目するときは原子軌道を指す添字  $j$  は原子核の位置、すなわちサイトと一対一に対応する。以下では簡単のために各原子がひとつの原子軌道しかもたない Tight-Binding 近似を考えることにする。このとき  $N$  はサイト数

<sup>\*4</sup> (原子核に) 強く束縛された近似、強束縛近似ということもある。

になる。原子軌道は原子核付近に局在しているが、異なる軌道間ではふつう多少の軌道の重なりが生じる。 $i$  番目の原子軌道と  $j$  番目の原子軌道の重なりを重なり積分と呼び、それを  $S_{ij}$  とすると

$$S_{ij} = \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

である。これを使うと eq. (2.9) の逆変換は

$$\hat{c}_{j\sigma} = \sum_{i=1}^N S_{ji}^{-1} \int d\mathbf{x} \psi_{i\sigma}^*(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad (2.14)$$

となる<sup>\*5</sup>。さらに eq. (2.14) と eq. (2.3) を用いると次の反交換関係を得る<sup>\*6</sup>。

$$[\hat{c}_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = S_{ij}^{-1} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad [\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger]_+ = [c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ = 0 \quad (2.15)$$

原子軌道の局在性が強く、異なる原子軌道間での重なりを無視する場合は  $S_{ij} = S_{ij}^{-1} = \delta_{ij}$  となって eq. (2.15) は Fermi 粒子の反交換関係となる。そのため  $\{|j\sigma\rangle\}$  は正規直交基底となる<sup>\*7</sup>。このときの原子軌道

\*5

$$\begin{aligned} \hat{c}_{j\sigma} &= \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{l=1}^N \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{jl} \hat{c}_{l\sigma'} \\ &= \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \delta_{\sigma\sigma'} \sum_{l=1}^N \sum_{i=1}^N S_{ji}^{-1} S_{il} \hat{c}_{l\sigma'} \\ &= \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sigma^*(s) \sigma'(s) \sum_{l=1}^N \sum_{i=1}^N S_{ji}^{-1} \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_l(\mathbf{r}) \hat{c}_{l\sigma'} \\ &= \sum_{i=1}^N S_{ji}^{-1} \sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \sigma^*(s) \underbrace{\sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{l=1}^N \varphi_l(\mathbf{r}) \sigma'(s) \hat{c}_{l\sigma'}}_{\hat{\psi}(\mathbf{r};s)} \\ &= \sum_{i=1}^N S_{ji}^{-1} \sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \sigma^*(s) \hat{\psi}(\mathbf{r};s) \end{aligned}$$

\*6

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^\dagger]_+ &= \left[ \sum_{k=1}^N S_{ik}^{-1} \sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{r} \varphi_k^*(\mathbf{r}) \sigma^*(s) \hat{\psi}(\mathbf{r};s), \sum_{l=1}^N S_{lj}^{-1} \sum_{s'=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{r}' \varphi_l^*(\mathbf{r}') \sigma'^*(s') \hat{\psi}(\mathbf{r}';s') \right]_+ \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N S_{ik}^{-1} S_{lj}^{-1} \sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sum_{s'=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \varphi_k^*(\mathbf{r}) \sigma^*(s) \varphi_l^*(\mathbf{r}') \sigma'^*(s') \underbrace{[\hat{\psi}(\mathbf{r};s), \hat{\psi}(\mathbf{r}';s')]_+}_{\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta_{ss'}} \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N S_{ik}^{-1} S_{lj}^{-1} \sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \int d^3\mathbf{r} \varphi_k^*(\mathbf{r}) \sigma^*(s) \varphi_l^*(\mathbf{r}) \sigma'^*(s) \\ &= \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N S_{ik}^{-1} S_{kl} S_{lj}^{-1} \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= S_{ij}^{-1} \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned}$$

<sup>\*7</sup> eq. (2.15) に左から  $\langle \text{vac} |$ 、右から  $| \text{vac} \rangle$  をかけると  $\langle i\sigma | j\sigma' \rangle = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}$  が得られる。

関数  $\varphi_j(\mathbf{r})$  を Wannier 関数と呼び、 $\varphi_j(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  と書くことが多い。 $\mathbf{R}_j$  は原子核の位置  $j$  の位置座標である。

Tight-Binding 近似でのハミルトニアンは eq. (2.5) に eq. (2.9) を代入すれば求まる。その前に hopping 積分<sup>\*8</sup>  $t_{kj}$  と Coulomb 積分  $U_{ijkl}$  を次式で定義しておく。

$$t_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} - \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_j(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

$$U_{ijkl} \stackrel{\text{def}}{=} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi_k(\mathbf{r}') \varphi_l(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

これとスピン関数の直交性 eq. (2.12) を用いるとハミルトニアン eq. (2.5) は

$$\hat{H} = - \underbrace{\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}}_{\hat{K}} + \frac{1}{2} \underbrace{\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N U_{ijkl} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma}}_{\hat{H}_U} \quad (2.18)$$

となる<sup>\*9</sup>。これが Tight-Binding 近似での電子系のハミルトニアンである。今後は eq. (2.18) の第一項を hopping 項と呼び、 $\hat{K}$  で表すことにする。また第二項を Coulomb 項と呼び、 $\hat{H}_U$  で表すことにしよう。

hopping 項  $\hat{K}$  は電子の状態をひとつだけ変える、いわゆる一体演算子である。一体演算子は簡単な操作で行列の形に書き直すことができる。eq. (2.18) の  $\hat{K}$  の場合だと、左から  $\langle k\sigma' |$ 、右から  $| l\sigma'' \rangle$  を掛ければ、 $\langle k\sigma' | \hat{K} | l\sigma'' \rangle$  は大きさ  $2N \times 2N$  の行列の行列要素である。

一方、Coulomb 項  $\hat{H}_U$  はふたつの電子の状態を変える二体演算子である。この場合も一体演算子のときと同じように、左から  $\langle k\sigma_k, l\sigma_l |$ 、右から  $| m\sigma_m, n\sigma_n \rangle$  を掛けることで行列の形に書き直すことができる。た

<sup>\*8</sup> 飛び移り積分、transfer 積分ということもある。

<sup>\*9</sup>

$$\begin{aligned} \hat{K} &= \int d\mathbf{x} \left( \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \psi_i^*(\mathbf{x}) c_{i\sigma}^\dagger \right) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \left( \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^N \psi_j(\mathbf{x}) \hat{c}_{j\sigma'} \right) \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_j(\mathbf{r}) \underbrace{\sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sigma^*(s) \sigma'(s) c_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'}}_{\delta_{\sigma\sigma'}} \\ &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \int d^3\mathbf{r} \varphi_i^*(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \varphi_j(\mathbf{r}) c_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}, \\ \hat{H}_U &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \left( \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \psi_i^*(\mathbf{x}) c_{i\sigma}^\dagger \right) \left( \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^N \psi_j^*(\mathbf{x}') c_{j\sigma'}^\dagger \right) U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \left( \sum_{\sigma''=\uparrow,\downarrow} \sum_{k=1}^N \psi_k(\mathbf{x}') \hat{c}_{k\sigma''} \right) \left( \sum_{\sigma'''=\uparrow,\downarrow} \sum_{l=1}^N \psi_l(\mathbf{x}) \hat{c}_{l\sigma'''} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} \sum_{ijkl} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi_k(\mathbf{r}') \varphi_l(\mathbf{r}) \underbrace{\sum_{s=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sigma^*(s) \sigma''(s)}_{\delta_{\sigma\sigma''}} \underbrace{\sum_{s'=-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sigma'^*(s') \sigma'''(s')}_{\delta_{\sigma'\sigma'''}} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma''} \hat{c}_{l\sigma'''} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}') U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \varphi_k(\mathbf{r}') \varphi_l(\mathbf{r}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma} \end{aligned}$$

だし、この場合ハミルトニアンの固有値を厳密に求めるためには、その行列の大きさは  $(2NC_2) \times (2NC_2)$  となる。そのため厳密に固有値を求めるのが容易ではない。そこで、その固有状態を求めるのにしばしば近似が用いられる。その近似のひとつが次節で述べる Hartree-Fock 近似である。詳細は 3.1 に譲るが、Hartree-Fock 近似のもとでは二体演算子を一体演算子として扱うことができる。

これからの表式を簡単化するために、次の 2 成分ベクトル演算子

$$\mathbf{c}_j \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \hat{c}_{j\uparrow} \\ \hat{c}_{j\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_j^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

を導入しておく。これを用いると、hopping 項と Coulomb 項はそれぞれ

$$\hat{K} = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N t_{ij} \mathbf{c}_i^\dagger \mathbf{c}_j \quad (2.20)$$

$$\hat{H}_U = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N U_{ijkl} \mathbf{c}_i^\dagger \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{c}_k \mathbf{c}_l \quad (2.21)$$

と表せる。本来であれば、 $\text{CuO}_2$  平面の電子状態をスピン渦を含めて記述しなければならないので、eq. 2.5 は 1 次摂動として交換相互作用  $H_{s-s}$ 、4 次摂動としてホールを挟む電子間の超交換相互作用  $H_J$  を含まなければならない。しかしながら、後述する共役勾配法による  $\xi$  の最適化でのみ  $H_{s-s}$  と  $H_J$  を含めて計算し、スピン渦誘起ループ電流の導出には共通するエネルギー定数としてしか関わらないため、その導出するためのハミルトニアンには含めない。

### 2.1.2 スピンが捻れた基底

ここまでは電子のスピンが上向きあるいは下向きの状態だけを取り扱ってきた。本小節は電子のスピンが任意の方向を向いた状態を記述するのに便利な表式を導入するのが目的である。この表式は系が磁気的な秩序をもつ場合に威力を発揮する。任意の方向を向いたスピンを表す状態は上向き、下向きスピンの状態を  $U(2) = U(1) \otimes SU(2)$  行列によって変換して得られる。スピンの向きは変換行列の  $SU(2)$  部分に含まれるふたつのパラメータに指定される。残った  $U(1)$  部分のパラメータには物理的な意味はあるだろうか。実はこの  $U(1)$  部分のパラメータこそが、スピン渦誘起ループ電流の原因となっているのである。

スピンが上向き、下向きの状態

スピンが上向きの状態および下向きの状態とはどのようなものか、いま一度明確にしておきたい。

スピン演算子を  $\hat{S}_j$  とする。また、 $z$  軸となす角を  $\theta_j$ 、 $x$  軸から測った方位角を  $\xi_j$  とする方向 (方向  $(\xi_j, \theta_j)$  と表すことにする。) を向いた単位ベクトルを  $\mathbf{e}(\xi_j, \theta_j)$  とする。このとき  $\hat{S}_j^2$  が  $\hat{S}_j \cdot \mathbf{e}(\xi_j, \theta_j)$  と交換する、すなわち

$$[\hat{S}_j^2, \hat{S}_j \cdot \mathbf{e}(\xi_j, \theta_j)] = 0 \quad (2.22)$$

を満たす方向  $(\xi_j, \theta_j)$  を量子化方向とよぶ。

$\hat{S}_j \cdot \mathbf{e}(\xi_j, \theta_j)$  は固有値  $\pm\hbar/2$  をもつ。特に、量子化方向を  $z$  軸としたときの固有値  $+\hbar/2$  に属する固有状態を上向き状態とよび、 $|j \uparrow\rangle$  で表す。また固有値  $-\hbar/2$  に属する固有状態を下向き状態とよび、 $|j \downarrow\rangle$  で表す。

スピン演算子  $\hat{S}_j$  の具体的な表式は基底を定めることで決まる。たとえば  $c_j^\dagger|\text{vac}\rangle$  を選んだ場合は、Pauli 行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

を用いて

$$\hat{S}_j = \hat{S}_j^x \mathbf{e}_x + \hat{S}_j^y \mathbf{e}_y + \hat{S}_j^z \mathbf{e}_z \quad (2.24)$$

$$\hat{S}_j^x = \frac{\hbar}{2} c_j^\dagger \sigma_x c_j = \frac{\hbar}{2} (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}) \quad (2.25)$$

$$\hat{S}_j^y = \frac{\hbar}{2} c_j^\dagger \sigma_y c_j = \frac{\hbar}{2} (-c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}) \quad (2.26)$$

$$\hat{S}_j^z = \frac{\hbar}{2} c_j^\dagger \sigma_z c_j = \frac{\hbar}{2} (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \quad (2.27)$$

と表される。eq. (2.27) から上向き状態  $|j \uparrow\rangle$  と下向き状態  $|j \downarrow\rangle$  とは、それぞれ  $\hat{S}_j^z$  の固有値  $+\hbar/2$  と  $-\hbar/2$  とに属する固有状態であることが確認できる。

任意の方向を向いたスピンの 上向き状態、下向き状態

まず、スピン演算子  $S_j$  のベクトル  $\mathbf{e}(\xi_j, \theta_j)$  に対する射影を

$$\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j) \stackrel{\text{def}}{=} \hat{S}_j \cdot \mathbf{e}(\xi_j, \theta_j) \quad (2.28)$$

としておこう。次に、量子化方向を任意の方向  $(\xi_j, \theta_j)$  にしたときにおける  $\hat{S}_j \cdot \mathbf{e}(\xi_j, \theta_j)$  の固有値  $+\hbar/2$  に属する固有状態を  $a$  状態とよび、 $|ja\rangle = a_j^\dagger|\text{vac}\rangle$  で表すことにする。同様に、固有値  $-\hbar/2$  に属する固有状態を  $b$  状態とよび、 $|jb\rangle = b_j^\dagger|\text{vac}\rangle$  で表すことにしよう。つまり

$$\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j)|ja\rangle = \frac{\hbar}{2}|ja\rangle, \quad \hat{S}_j(\xi_j, \theta_j)|jb\rangle = -\frac{\hbar}{2}|jb\rangle \quad (2.29)$$

である。前者は方向  $(\xi_j, \theta_j)$  に対する 上向き状態、後者は方向  $(\xi_j, \theta_j)$  に対する 下向き状態 に相当する。またサイト  $j$  に  $a$  状態、 $b$  状態の電子を生成（消滅）させる演算子をそれぞれ  $a_j^\dagger$  ( $a_j$ )、 $b_j^\dagger$  ( $b_j$ ) とする。すなわち

$$\langle \text{vac} | a_j = \langle ja |, \quad a_j^\dagger | \text{vac} \rangle = |ja \rangle, \quad \langle \text{vac} | b_j = \langle jb |, \quad b_j^\dagger | \text{vac} \rangle = |jb \rangle \quad (2.30)$$

である。さらに 2 成分ベクトル演算子  $\mathbf{d}_j$  を

$$\mathbf{d}_j \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d}_j^\dagger = (a_j^\dagger \ b_j^\dagger) \quad (2.31)$$

で定義すれば、eq. (2.27) のように

$$\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j) = \frac{\hbar}{2} \mathbf{d}_j^\dagger \sigma_z \mathbf{d}_j \quad (2.32)$$

と対角化可能なはずである。

それでは  $\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j)$  の定義と eq. (2.24)-eq. (2.27) を用いて  $\mathbf{d}_j$  を求めてみよう。

$$\begin{aligned} \hat{S}_j(\xi_j, \theta_j) &= \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \mathbf{e}(\xi_j, \theta_j) \\ &= \hat{S}_j^x \cos \xi_j \sin \theta_j + \hat{S}_j^y \sin \xi_j \sin \theta_j + \hat{S}_j^z \cos \theta_j \\ &= \frac{\hbar}{2} \mathbf{c}_j^\dagger \underbrace{\begin{pmatrix} \cos \theta_j & e^{-i\xi_j} \sin \theta_j \\ e^{i\xi_j} \sin \theta_j & -\cos \theta_j \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}_j} \mathbf{c}_j \end{aligned} \quad (2.33)$$

eq. (2.33) に現れた行列  $\mathbf{M}_j$  は  $\mathbf{M}_j = \mathbf{M}_j^\dagger$ 、すなわちエルミート行列であるからユニタリ行列によって必ず対角化できる。またユニタリ行列の逆行列はそのユニタリ行列の複素共役転置行列である。したがって行列  $\mathbf{M}_j$  を対角化するユニタリ行列を  $\mathbf{P}_j$  とすると、

$$\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j) = \frac{\hbar}{2} \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{P}_j \mathbf{P}_j^\dagger \mathbf{M}_j \mathbf{P}_j \mathbf{P}_j^\dagger \mathbf{c}_j \quad (2.34)$$

と表せる。eq. (2.32) と eq. (2.34) とを比較すれば

$$\mathbf{d}_j = \mathbf{P}_j^\dagger \mathbf{c}_j \quad (2.35)$$

となる。つまり対角化行列  $\mathbf{P}_j$  を求める問題に帰着した。

対角化行列を求めるためには、まず固有値問題を解いて固有値を求め、得られた各々の固有値に属する固有ベクトルを求める必要がある。そしてそれらをヨコに並べれば対角化行列が求まる。ただし、得られた固有ベクトルを正規直交系となるようにとりなおし、それらを並べたものを対角化行列とするのが通常やり方である。すると対角化行列はユニタリ行列となって取り扱いやすくなる。そのため以下でも固有ベクトルは正規直交系となるようにとることにする。

eq. (2.32) も示しているように、 $\mathbf{P}_j$  の固有値は既に明らかであって、その値は  $\pm 1$  である。固有値  $+1$ 、 $-1$  に属する規格化された固有ベクトルをそれぞれ  $\mathbf{v}_j^+$ 、 $\mathbf{v}_j^-$  とすると

$$\mathbf{v}_j^+ = e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} \\ e^{i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_j^- = e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} \\ e^{i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

となる。一般に、固有ベクトルの位相は固有値問題を解いただけでは決められない。そのためふたつのベクトル  $\mathbf{v}_+$ 、 $\mathbf{v}_-$  に共通な位相因子  $e^{-i\frac{\xi_j}{2}}$  をもたせてあることに注意されたい。なぜふたつのベクトルにもたせた位相因子を共通の値に選んだのかはすぐに明らかになる。

対角化行列  $\mathbf{P}_j$  は固有ベクトル  $\mathbf{v}_j^+$ 、 $\mathbf{v}_j^-$  をヨコに並べることによってつくることができる。

$$\mathbf{P}_j = (\mathbf{v}_j^+ \ \mathbf{v}_j^-) = e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} & -e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} \\ e^{i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} & e^{i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$



$v_j^+$  と  $v_j^-$  の両者がもつ位相因子を一致させたのは、行列  $P_j$  をユニタリ行列とするためである。実際、 $v_j^+$  と  $v_j^-$  にもたせる位相因子が異なると  $P_j$  がユニタリ行列とならないことが確認できるだろう。

行列  $P_j$  が求まったので、 $a$  状態と  $b$  状態を定める演算子  $d_j^\dagger$  は求まったも同然である。eq. (2.37) と eq. (2.35) から

$$d_j = e^{i\frac{\chi_j}{2}} \underbrace{\begin{pmatrix} e^{i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} & e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} \\ -e^{i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} & e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} \end{pmatrix}}_{V_j(\xi_j, \theta_j)} c_j, \quad d_j^\dagger = c_j^\dagger e^{-i\frac{\chi_j}{2}} \underbrace{\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} & -e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} \\ e^{i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} & e^{i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} \end{pmatrix}}_{V_j^\dagger(\xi_j, \theta_j)} \quad (2.38)$$

である。

$$\begin{aligned} \Gamma_{ij} &\stackrel{\text{def}}{=} V_i(\xi_i, \theta_i) V_j^\dagger(\xi_j, \theta_j) \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \cos \frac{\theta_i - \theta_j}{2} + i \sin \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \cos \frac{\theta_i + \theta_j}{2} & -\cos \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \sin \frac{\theta_i - \theta_j}{2} - i \sin \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \sin \frac{\theta_i + \theta_j}{2} \\ \cos \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \sin \frac{\theta_i - \theta_j}{2} - i \sin \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \sin \frac{\theta_i + \theta_j}{2} & \cos \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \cos \frac{\theta_i - \theta_j}{2} - i \sin \frac{\xi_i - \xi_j}{2} \cos \frac{\theta_i + \theta_j}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.39)$$

とすると、 $c_{j\sigma}^\dagger$  と  $\hat{c}_{j\sigma}$  の反交換関係 eq. (2.15) から  $a_j^\dagger$ 、 $a_j$ 、 $b_j^\dagger$  および  $b_j$  について次の反交換関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger]_+ &= S_{ij}^{-1} e^{i\frac{\chi_i - \chi_j}{2}} (\Gamma_{ij})_{11}, & [a_i, b_j^\dagger]_+ &= S_{ij}^{-1} e^{i\frac{\chi_i - \chi_j}{2}} (\Gamma_{ij})_{12} \\ [b_i, a_j^\dagger]_+ &= S_{ij}^{-1} e^{i\frac{\chi_i - \chi_j}{2}} (\Gamma_{ij})_{21}, & [b_i, b_j^\dagger]_+ &= S_{ij}^{-1} e^{i\frac{\chi_i - \chi_j}{2}} (\Gamma_{ij})_{22} \\ [a_i, a_j]_+ &= [a_i, b_j]_+ = [b_i, a_j]_+ = [b_i, b_j]_+ = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = [a_i^\dagger, b_j^\dagger]_+ = [b_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = [b_i^\dagger, b_j^\dagger]_+ = 0 \end{aligned} \quad (2.40)$$

特に、 $i = j$  のときは eq. (2.40) の反交換関係は  $[a_i, a_j^\dagger]_+$  と  $[b_i, b_j^\dagger]_+$  を除いてすべて 0 となる。なお  $d_j$ 、 $d_j^\dagger$  を使うとスピン演算子  $\hat{S}_j$  の各成分は

$$\hat{S}_j^x = \frac{\hbar}{2} d_j^\dagger \begin{pmatrix} \cos \xi_j \sin \theta_j & i \sin \xi_j + \cos \xi_j \cos \theta_j \\ -i \sin \xi_j + \cos \xi_j \cos \theta_j & -\cos \xi_j \sin \theta_j \end{pmatrix} d_j \quad (2.41)$$

$$\hat{S}_j^y = \frac{\hbar}{2} d_j^\dagger \begin{pmatrix} \sin \xi_j \sin \theta_j & -i \cos \xi_j + \sin \xi_j \cos \theta_j \\ i \cos \xi_j + \sin \xi_j \cos \theta_j & -\sin \xi_j \sin \theta_j \end{pmatrix} d_j \quad (2.42)$$

$$\hat{S}_j^z = \frac{\hbar}{2} d_j^\dagger \begin{pmatrix} \cos \theta_j & -\sin \theta_j \\ -\sin \theta_j & -\cos \theta_j \end{pmatrix} d_j \quad (2.43)$$

と表せる。

### $\chi_j$ の役割

eq. (2.38) の変換行列の  $e^{-i\frac{\chi_j}{2}}$  と  $V_j(\xi_j, \theta_j)$  はそれぞれ群  $U(1)$  と  $SU(2)$  に属している。 $SU(2)$  部分のふたつのパラメータ  $\xi_j$  と  $\theta_j$  は明確な物理的意味を持つ。 $\xi_j$  と  $\theta_j$  は、 $|ja\rangle$ 、 $|jb\rangle$  をそれぞれ 上向きスピン状態、下向きスピン状態 とする量子化方向  $(\xi_j, \theta_j)$  を定めるパラメータである。このことは既に述べた。それでは  $U(1)$  部分のパラメータ  $\chi_j$  の物理的意味を明らかにする。

$\chi_j$  の役割を見るのには  $\chi_j$  を含む位相因子  $e^{i\frac{\chi_j}{2}}$  を落としたときにどのような不具合が起こるかを見ていく。

そこでまずは eq. (2.38) において位相因子を省いた場合、すなわち  $d_j = V_j(\xi_j, \theta_j)c_j$  とした場合を考えよう。  $\xi_j \rightarrow \xi_j + 2\pi$  としてみると、  $\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j) = \hat{S}_j(\xi_j + 2\pi, \theta_j)$  である一方で、  $V_j(\xi_j, \theta_j) = -V_j(\xi_j + 2\pi, \theta_j)$  である。  $\theta_j$  についても同様のことがいえる。  $\theta_j \rightarrow \theta_j + 2\pi$  としてみると、  $\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j) = \hat{S}_j(\xi_j, \theta_j + 2\pi)$  である一方で、やはり  $V_j(\xi_j, \theta_j) = -V_j(\xi_j, \theta_j + 2\pi)$  である。以上のことから、  $\hat{S}_j(\xi_j, \theta_j)$  に対する 上向きスピン状態  $|ja\rangle$ 、下向きスピン状態  $|jb\rangle$  はそれぞれ

$$|ja\rangle = \pm \left( e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} |j \uparrow\rangle + e^{i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} |j \downarrow\rangle \right) \quad (2.44)$$

$$|jb\rangle = \pm \left( -e^{-i\frac{\xi_j}{2}} \sin \frac{\theta_j}{2} |j \uparrow\rangle + e^{i\frac{\xi_j}{2}} \cos \frac{\theta_j}{2} |j \downarrow\rangle \right) \quad (2.45)$$

となる。つまりスピンの状態ベクトルは 2 価になる。波動関数はその厳密解が座標に対して一価になる。系に電子が 1 つしかなく、座標に関係ないならばこの多価性は問題にならない。しかし、スピンの  $j$  に対して変化する場合はこの多価性が問題になる。なので、位相パラメーター  $\chi_j$  によって状態ベクトルを一価に保つことにした。

今度は eq. (2.38) において位相因子を復活させ、  $d_j = e^{i\frac{\chi_j}{2}} V_j(\xi_j, \theta_j)c_j$  とした場合を考えよう。この場合は、例えば  $\xi_j \rightarrow \xi_j + 2\pi$  として  $V_j(\xi_j, \theta_j)$  の符号が変わっても同時に  $\chi_j \rightarrow \chi_j + 2\pi$  として位相因子の符号も変わるような制約をつけることで変換を 1 価にできる。要するに  $\chi_j$  があることによって、 $\xi_j$  あるいは  $\theta_j$  による符号交代が起きたとしてもそれを抑制して波動関数は一価に保たれる。このように変換の一価性を保つのが  $\chi_j$  の役割である。

### § 3 Car-Parrinello の方法によるスピン渦の導出

ここからは、スピン渦誘起ループ電流が存在する系の波動関数を求める方法を説明する。まず、 $\text{CuO}_2$  平面においてそれぞれの銅原子の  $3d_{x^2-y^2}$  軌道に属する電子は 1 つであるから、その総数は銅原子の数と同じになる。このような系を Effective-Half-Filled-Situation(EHFS) と呼ぶ。しかしながら、スピン渦を有する系にはホールがあるため、そのサイトを抜いた全サイトに対して EHFS である。この系の多体波動関数は EHFS として扱うことが可能なため、電子の準位は  $2 \times$  サイト数までのみを考えるものとする。波動関数はその座標に対する一価性の要請から、形は eq. 1.1 と同様になる。ここで、 $\Phi_0$  は系の構造因子である。しかし、この波動関数  $\Phi$  は座標に対して一部のスピンの多価になるため、多価関数になる。波動関数の厳密解は必ず一価なので、位相因子が波動関数を一価に保つため導入される。この章では  $\Phi_0$  を、次章では位相因子を求める方法を詳述する。

スピン渦を含む一電子波動関数を求めるには、まず共役勾配法を用いて  $\Delta\xi$  の初期値を求め、それを Car-Parrinello 法を用いて自己無撞着的に計算する。

#### 3.1 スピンハミルトニアンによる $\xi$ の最適化

EHFS の全ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}
H_{EHFS}^{tot} = & - \sum_{\langle i,j \rangle_1, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \\
& + U \sum_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + J \sum_{\langle i,j \rangle_1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J' \sum_{\langle i,j \rangle_h} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + H_{RSO}
\end{aligned} \tag{3.1}$$

と、表される。ここで  $\langle k, j \rangle_1$  とは互いに第一近接となるサイトのペアである。また、 $\langle i, j \rangle_h$  はホールに占有されたサイトの隣とそのホールと隣接した別のサイトとのペアである。第 3 項は電子の間に働く交換相互作用である。この項は第 1 項の一次摂動から導かれ、 $J = t^2/U$  となっている。第 4 項はホールを挟んだ電子のペアに働く超交換相互作用であり、この項は 4 次の摂動から導かれる。これは電子がホールを経由して 2 サイト離れた電子との間に働くものである。その値は酸素原子の反結合軌道のエネルギー準位を  $\epsilon_h$ 、結合軌道のエネルギー準位を  $\epsilon_d$  として、銅原子の  $3d_{x^2-y^2}$  軌道と酸素原子の反結合軌道間のエネルギー準位差を  $t_{dh}$  とすると  $J' \approx 2t_{dh}^4/(\epsilon_h - \epsilon_d)^3$  程度になる。 $\xi$  の最適化では、第 3、4 項のみを古典的に共役勾配法で最適化する。Car-Parrinello 法による波動関数の導出以降では第 4 項から先の項はスピン渦誘起ループ電流の形成にはその電流パターンに関係なく定数として影響するため、第 3 項はクーロン項と共にハートリー・フォック近似を施し、第 4 項は省略する。第 5 項は Rashba スピン軌道相互作用のハミルトニアンであるが、これはスピンの CuO<sub>2</sub> 平面に寝る原因となっている。しかし、これも定数として影響するため、この項は計算に含めない。第 3 項を古典的なスピンのみで表し、全スピンエネルギーを計算すると、

$$E = \frac{1}{4} J \sum_{\langle i,j \rangle_1} \cos(\xi_i - \xi_j) \tag{3.2}$$

となる。和を空間積分に置き換えると、

$$E \approx - \int (\nabla \xi)^2 d\mathbf{r}^2 \tag{3.3}$$

となる。 $\nabla \xi$  の極座標成分による微分は、特異点により、

$$\frac{\partial}{\partial r}(\nabla \xi) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \theta}(\nabla \xi) = \frac{\sum_{i=1}^{N_h} n_i}{r} \tag{3.4}$$

が導かれる。ここで、 $N_h$  はホールの数、 $n_i$  はホール  $i$  が属するループ周りの回転数、つまり一般的な巻き数であり、

$$\oint \nabla \xi \cdot d\mathbf{r} = 2\pi \sum_{i=1}^{N_h} n_i \tag{3.5}$$

と表される。ストークスの定理から、

$$\int (\nabla \times (\nabla \xi)) d\mathbf{r}^2 = \oint \nabla \xi \cdot d\mathbf{r} = 2\pi \sum_{i=1}^{N_h} n_i \tag{3.6}$$

が導かれる。スピンの面内角  $\xi$  の変化を  $\nabla\xi$  として、それと直交する変数  $\nabla\psi$  を考える。ホールは特異点となるので、eq. 3.2 を基に  $\xi$  が従う式を計算すると

$$\begin{aligned} (\nabla \times (\nabla \xi))_z &= 2\pi \sum_{i=1}^{N_h} n_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \\ &= -\Delta\psi \end{aligned} \quad (3.7)$$

が導かれる。ここで  $\mathbf{r}_i$  はホールの座標である。この式は 2 次元ポアソン方程式の形をしているので、その解は

$$\psi = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} n_j \ln(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (3.8)$$

である。この式は  $\mathbf{r}$  が複素数である場合には多価関数になるので、これを基に  $\xi$  の初期値を、

$$\xi_j = \pi(j_x + j_y) + \sum_{k=1}^{N_h} w_{C_l} [\nabla \xi] \ln(|(j_x + i j_y) - (k_x^h + i k_y^h)|) \quad (3.9)$$

とする。ここで、 $(j_x, j_y)$  はサイト  $j$  のそれぞれ  $x$  座標と  $y$  座標である。 $(k_x^h, k_y^h)$  はサイト  $k$  のそれぞれ  $x$  座標と  $y$  座標である。この効果を (3.2) に加えた  $\xi$  のエネルギー関数を

$$E[\xi] = \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle_1; i,j \in \text{acc.site}} \cos(\xi_i - \xi_j) + \frac{J'}{4} \sum_{\langle i,j \rangle_h; i,j \in \text{acc.site}} \cos(\xi_i - \xi_j) \quad (3.10)$$

とする。ここで、 $J' = 1/4J$  の時スピン渦が存在する系のエネルギーが存在しない系に比べて最も低くなる。

$\xi$  の最適化はこの  $E[\xi]$  が極小値となるような  $\xi$  の値を求めることを行う。

最適化の計算は共役勾配法を使う。この共役勾配法には基準となるエネルギーの関数の他にエネルギーの関数の変数の偏微分が必要となる。この偏微分は

$$\frac{\partial E[\xi]}{\partial \xi_k} = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_1; i=k} \sin(\xi_i - \xi_j) - \frac{J'}{2} \sum_{\langle i,j \rangle_h; i=k} \sin(\xi_i - \xi_j) \quad (3.11)$$

となる。

まず、銅酸化物高温超伝導体の  $\text{CuO}_2$  平面における  $3d_{x^2-y^2}$  軌道の電子は  $\text{Cu}$  原子の周りに局在化し、隣接する  $\text{Cu}$  原子のその軌道へのホッピングは起こりやすいが、それ以外のサイトには飛びにくい。また、クーロン斥力も同じサイトに電子が 2 つ存在する場合のみ有意義な値になると仮定することができる。従って、3.2 は

$$\begin{aligned} H_{\text{CuO}_2} &= - \sum_{\langle i,j \rangle_1, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \\ &\quad + U \sum_j c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \end{aligned} \quad (3.12)$$

と書きなおすことができる。ここで、 $\langle i, j \rangle_1$  は隣接するサイトを表す。クーロン項が 2 対の演算子だと、計算には  $(2N C_N) \times (2N C_N)$  次元の行列が必要になり、計算が現実的な時間で終わらなくなる。なので、クーロン項をスピンを含めた形で一体演算子に近似する。論文 [32] から、簡単な計算の後、ハミルトニアン  $H_{\text{CuO}_2}$  は

$$H_{\text{CuO}_2} = - \sum_{\langle i, j \rangle_1, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \quad (3.13)$$

$$+ U \sum_j \left[ \left( \frac{n_j}{2} - S_j^z \right) c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} - (S_j^x + i S_j^y) c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} - (S_j^x - i S_j^y) c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} + \left( \frac{n_j}{2} + S_j^z \right) c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \right]$$

と書き換えられる。ここで、 $n_j$  はサイト  $j$  に属する電子の個数である。また、 $S_j^x, S_j^y, S_j^z$  はサイト  $j$  に属する電子スピンの各成分の期待値である。これらは先ほどの定義と違い定数項を含まず 2.24 の各項から  $\hbar/2$  を抜いた形で表される。このハミルトニアンの、スピン渦を含んだ一電子波動関数は

$$|\tilde{\phi}_a\rangle = \sum_j^N (e^{-i\frac{\xi_j}{2}} D_{j\uparrow}^a c_{j\uparrow}^\dagger + e^{i\frac{\xi_j}{2}} D_{j\downarrow}^a c_{j\downarrow}^\dagger) |vac\rangle = \sum_j^N (\tilde{F}_{j\uparrow}^a c_{j\uparrow}^\dagger + \tilde{F}_{j\downarrow}^a c_{j\downarrow}^\dagger) |vac\rangle \quad (3.14)$$

と表すことにしよう。ここで、§2 章と同様に  $\xi_j$  はサイト  $j$  に属する電子が有するスピンの面内角である。この一電子波動関数を求めるには自己無撞着計算の手法の 1 つである Car-Parrinello 法を利用する [33]。これは、一電子波動関数を変数とする以下の汎関数ラグランジアン of the Car-parrinello 運動方程式を解き、エネルギーが極小になる点における波動関数を最適な波動関数とするものである。

$$L(\tilde{\phi}) = \frac{\mu}{2} \sum_{\gamma}^{N_e} \dot{\tilde{\phi}}_{\gamma}^2 - E(\tilde{\phi}) + \sum_{\gamma, \kappa}^{N_e} \Lambda_{\gamma\kappa} \langle \tilde{\phi}_{\gamma} | \tilde{\phi}_{\kappa} \rangle \quad (3.15)$$

$\tilde{\phi}_{\gamma}$  は一電子波動関数、 $S$  は電子のスピンの。  $\mu$ 、は電子の有効質量計数。これは計算のために導入された人為的なパラメーターである。  $N$  は  $\text{CuO}_2$  平面上の格子点の数、  $N_e$  は電子の数である。 Car-Parrinello の運動方程式はラグランジュ運動方程式のように

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta L}{\delta \dot{\tilde{\phi}}_{\gamma}} = \frac{\delta L}{\delta \tilde{\phi}_{\gamma}} \quad (3.16)$$

と表される。ただし、この方程式において時間はステップ数である。また、ステップ単位時間は  $\hbar$  である。これと eq. 3.15 から一電子波動関数  $\tilde{\phi}_{\gamma}$  が従う運動方程式は

$$\mu \ddot{\tilde{\phi}}_{\gamma} = - \frac{\partial E}{\partial \tilde{\phi}_{\gamma}} + \sum_{\kappa} \Lambda_{\gamma\kappa} \tilde{\phi}_{\kappa}(r) - \eta_{\gamma} \dot{\tilde{\phi}}_{\gamma} \quad (3.17)$$

となり、これは粘性抵抗がある中での調和振動子の運動方程式の形と一致する。ここで

$$\eta_\gamma = \eta_0(\epsilon_\gamma - \epsilon_0) \quad (3.18)$$

$$\Lambda_{\gamma\kappa} = \epsilon_\gamma \delta_{\gamma\kappa} \quad (3.19)$$

$$\epsilon_\gamma = \langle \tilde{\phi}_\gamma | H | \tilde{\phi}_\gamma \rangle \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial E}{\partial \tilde{\phi}_\gamma} = H \tilde{\phi}_\gamma \quad (3.21)$$

である。 $\eta_\gamma$  は粘性係数、本論ではすべての電子に対して  $\eta_\gamma = \eta_0$  とする。Verlet のアルゴリズムを用いて波動関数の二階時間微分をテーラー展開し、

$$\ddot{\phi}_\gamma(t) = \frac{1}{h^2}(\tilde{\phi}_\gamma(t+h) - 2\tilde{\phi}_\gamma(t) + \tilde{\phi}_\gamma(t-h)) \quad (3.22)$$

波動関数  $\tilde{\phi}_\gamma$  のサイト  $i'$  におけるスピン  $\sigma'$  を持った電子の係数は  $D_{i'\sigma'}^\gamma$  とすると、eq. 3.17 と 3.22 をもちいて

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i'\sigma'}^\gamma(t+h) = & \frac{1}{(1 + \frac{h\eta_\gamma}{2})} ((2 + h^2\epsilon_\gamma)\tilde{F}_{i'\sigma'}^\gamma(t) + (\frac{h\eta_\gamma}{2} - 1)\tilde{F}_{i'\sigma'}^\gamma(t-h)) \\ & - h^2 \sum_{i,\sigma}^N \langle vac | c_{i'\sigma'} H c_{i\sigma}^\dagger | vac \rangle \tilde{F}_{i\sigma}^\gamma(t) \end{aligned} \quad (3.23)$$

係数  $h$  に対する漸化式として  $\tilde{F}_{i'\sigma'}^\gamma(t+h)$  を eq.(3.24) から求め、 $S$  と波動関数の係数  $\tilde{F}_{i'\sigma'}^\gamma$  を Gram-Schmidt の方法で毎ステップ対角化しながらエネルギーのステップ間変化が緩やかになり、収束するまで計算する。その後その結果を元にもう一度 eq.(3.24) を  $\tilde{F}$  の収束条件を  $S$  にして計算する。実際にはすべてのサイトで  $\theta = \pi/2$  とするが、中性子散乱の実験でもスピンは面内に寝ることが確認されているため、このような近似を施した。そのため、スピンは  $\text{CuO}_2$  面内に寝ている [16]。

## § 4 一価波動関数の導出

この章では、スピン渦誘起ループ電流の導出法と、それが存在する系の一電子波動関数の求め方を解説する。前章までで求めた一電子波動関数  $|\tilde{\phi}_\gamma\rangle$  は座標に対してスピンが多価になる。従って波動関数全体も多価になる。波動関数は厳密解が必ず一価にならなければならないため、波動関数を一価に保つ何らかの方法を考えなければならない。この章では、まず波動関数を一価に保つための方法とそれにより生じる束縛条件について説明し、それを停留条件として条件付き極小値問題として一価の波動関数を導出する方法を詳述する [10]。eq. (3.14) に示した多価の波動関数は、任意の方向を向いた上向き、下向きスピンに対する基底  $a_{j\uparrow}^\dagger$ 、 $b_{j\downarrow}^\dagger$  におけるそれぞれの電子における上向きスピンと下向きスピンの存在確率を、 $c_{j\uparrow}^\dagger$ 、 $c_{j\downarrow}^\dagger$  の基底に直したものだ。ここで、真空を一電子波動関数  $|\tilde{\phi}_a\rangle$  に変える生成演算子  $c^\dagger(\tilde{\phi}_a)$  を定義し、系の多体波動関数を

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{a=1}^{N_e} c^\dagger(\tilde{\phi}_a) |vac\rangle \quad (4.1)$$

とする。この波動関数は多価になるが、その理由をここから解説する。まず、サイト  $j$  から  $k$  までの  $\xi$  の変化を

$$\Delta\xi_{kj} = (\xi_k - \xi_j) \quad (4.2)$$

とする。定義域の違いから、ホールを中心にするループ  $C_l$  に対して  $\Delta\xi$  の和を取り、 $-\pi$  から  $\pi$  の間に収め、和を取ると、その和は  $2\pi w_{C_l}[\nabla\xi]$  になる。つまり、

$$\xi_j \rightarrow \xi_j + 2\pi w_{C_l}[\nabla\xi] \quad (4.3)$$

である。これは、 $C_l$  に属する全ての電子をループに対して一周させると、戻ってきた状態には  $-i\pi w_{C_l}[\nabla\xi]$  の位相がかかることを意味する。ここで、 $w_{C_l}[\nabla\xi]$  は  $\xi$  をループ  $C_l$  に沿って経路積分した結果であり、これを  $\xi$  の巻き数と呼ぶ。これは、

$$w_{C_l}[\nabla\xi] = \frac{1}{2\pi} \sum_{\gamma \in C_l} ((\Delta\xi_\gamma \bmod 2\pi) - \pi) = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_l} \nabla\xi \cdot d\mathbf{r} \quad (4.4)$$

$$\Delta\xi_\gamma = (\xi_{C_l(i+1)} - \xi_{C_l(i)}) \quad (4.5)$$

と表される。ここで、ホール以外のサイトで囲まれた正方形をループとする。 $C_l(i)$  はループ  $l$  における  $i$  番目のサイト、 $N_l$  はループ  $l$  に属するサイトの数を表す。また、 $C_l(N_l + 1) = C_l(1)$  である。これは、スピンの座標に対して二価になることを意味する。しかし、波動関数の厳密解は一価でなければならない。なので、この位相の不定性は相殺しなければならない。

波動関数を一価にするために、一電子波動関数 eq.(3.14) に位相  $\chi$  を、同じようにホールを囲むループ  $C_l$  周りに  $\Delta\chi_{ij}$  の和を取ることに對して、

$$\chi_j \rightarrow \chi_j + 2\pi w_{C_l}[\nabla\chi] \quad (4.6)$$

となるように加え、

$$|\tilde{\phi}_a\rangle = \sum_j^N e^{-i\chi_j} (e^{-i\frac{\xi_j}{2}} D_{j\uparrow}^a c_{j\uparrow}^\dagger + e^{i\frac{\xi_j}{2}} D_{j\downarrow}^a c_{j\downarrow}^\dagger) |vac\rangle \quad (4.7)$$

とした。こうすることで、戻ってきた状態には  $-i\pi(\pm w_{C_l}[\nabla\xi] + w_{C_l}[\nabla\chi])$  の位相が加わる。更に、束縛条件

$$w_{C_l}[\nabla\xi] + w_{C_l}[\nabla\chi] = \text{even} \quad (4.8)$$

を波動関数に要求する。こうすることで全ての電子波動関数が一価に保たれる。この  $\chi$  は束縛条件 4.8 を満たすパラメーターであるが、その値を束縛条件として、エネルギーを最小化することによって求めることができる。ここからは、その方法を解説する [34]。エネルギー  $E[\nabla\chi]$  を条件

$$w_{C_l}[\nabla\chi] = \frac{1}{2\pi} \sum_{\gamma \in C_l} L(l, \gamma) \Delta\chi_\gamma = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_l} \nabla\chi \cdot d\mathbf{r} \quad (4.9)$$

のもとで、ラグランジェの未定係数法を用いて解くのである。

$$\Delta\chi_\gamma = \chi_k - \chi_j \quad L(l, \gamma) = \begin{cases} 1 & k > j \text{ in } C.W \text{ direction} \\ -1 & k > j \text{ in } C.C.W \text{ direction} \\ 0 & k \notin C_l \cup j \notin C_l \end{cases} \quad (4.10)$$

ここで、新しい関数  $L(l, \gamma)$  を定義した。これは、Fig. (5) の系におけるループを構成する各ボンドにおける  $\Delta\chi_\gamma$  の値を、サイト番号が  $k > j$  となる場合には負、 $k < j$  となる場合には正の符号で重み付けして左回りに和を取る関数である。例えば、ループ  $C_1$  に対して  $L(l, \gamma)\Delta\chi_\gamma$  の和は

$$\sum_{\gamma \in C_1} L(1, \gamma) \Delta\chi_\gamma = \Delta\chi_1 + \Delta\chi_{18} - \Delta\chi_{17} - \Delta\chi_6 \quad (4.11)$$

と計算される。

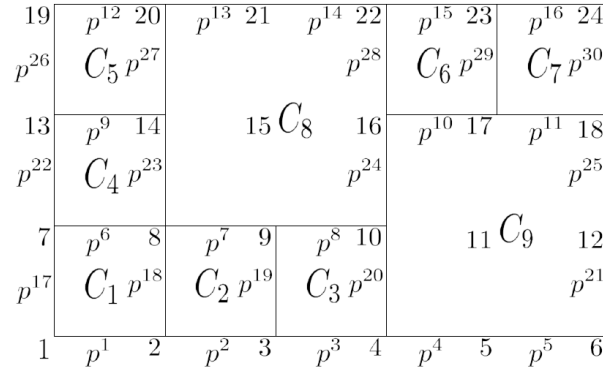


Fig. 5 CuO<sub>2</sub> におけるループのとり方とサイト、ボンドの名前付け規則。  $C_i$  は  $i$  番目のループ、  $p^i$  は  $i$  番目のボンドを表す。サイト番号は左から右、下から上へ計上する。ホールの部分も同様に計上している。

ラグランジェ汎関数

$$I = E[\Delta\chi] + \sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l (2\pi w_l - \sum_{\gamma \in C_l} L(l, \gamma) \Delta\chi_\gamma) \quad (4.12)$$



は、極小値をとるとき、その微分は 0 になる。これを  $\Delta\chi$  について微分すると、電流の形になる

$$\frac{\partial \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\partial \Delta\chi_\mu} = \sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l \frac{\partial}{\partial (\Delta\chi_\mu)} \left( \sum_{v \in C_l} L(l, v) \Delta\chi_v \right) \quad (4.13)$$

これを解けば良い。ここで、なぜ eq.(4.13) が電流の形なのか解説する。量子力学における電流密度の演算子は  $\hat{\mathcal{J}}(\mathbf{r}) = \frac{\partial E}{\partial A(\mathbf{r})}$  で表される。Hubberd 模型においてベクトルポテンシャルを取り扱う方法として Peierls の位相因子として導入する方法が知られている。これは、系におけるベクトルポテンシャルの変化は原子スケールで緩やかであると仮定して、運動エネルギーを  $t_{ij} \rightarrow t_{ij} \exp(\frac{iq}{\hbar} \int_{r_j}^{r_i} A(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r})$  と書き換える方法である。まず、運動エネルギーとその期待値は、

$$\hat{K} = - \sum_{\langle k, j \rangle_1}^N t_{kj} (\hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} + \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \hat{c}_{k\downarrow}) \quad (4.14)$$

$$K = - \sum_{\langle k, j \rangle_1}^N \sum_{\gamma}^{N_e} t_{kj} [e^{i \frac{\Delta\chi_{kj}}{2}} (e^{\frac{i}{2}(\xi_k - \xi_j)} (D_{k\uparrow}^\gamma)^* D_{j\uparrow}^\gamma + e^{-\frac{i}{2}(\xi_k - \xi_j)} (D_{k\downarrow}^\gamma)^* D_{j\downarrow}^\gamma) + c.c.] \quad (4.15)$$

と表される。期待値に現れている  $e^{i \frac{\Delta\chi_{kj}}{2}}$  はまさに Peierls の位相と同じ形をしている。eq. 1.2 でも示したように、 $\hbar/2q\Delta\chi_{kj}$  はベクトルポテンシャルとして扱うことができるのである。従って、サイト  $k, j (k > j)$  間のパス  $\mu$  を流れる電流の電流演算子は、 $\hbar/2q\Delta\chi_{kj}$  でこれを微分して、

$$\hat{\mathcal{J}}_{kj} = -ie(\hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} - \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}) \quad (4.16)$$

$$\langle \Phi | \hat{\mathcal{J}}_{kj} | \Phi \rangle = -\frac{2|e|t_{kj}}{\hbar} \text{Re}(e^{\frac{i}{2}(\xi_k - \xi_j)} (D_{k\uparrow}^\gamma)^* D_{j\uparrow}^\gamma + e^{-\frac{i}{2}(\xi_k - \xi_j)} (D_{k\downarrow}^\gamma)^* D_{j\downarrow}^\gamma) \sin(\frac{\Delta\chi_\mu}{2}) \quad (4.17)$$

と書ける。解くべき方程式は両辺の係数  $2|e|/\hbar$  を省いて、

$$\sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l \frac{\partial}{\partial (\Delta\chi_\mu)} \left( \sum_{v \in C_l} L(l, v) \Delta\chi_v \right) = D_\mu \sin(\frac{\Delta\chi_\mu}{2}) \quad (4.18)$$

であるが、これは非線形方程式の形をしている。なので、まず簡単のために

$$t_{kj} \text{Re}(e^{\frac{i}{2}(\xi_k - \xi_j)} (D_{k\uparrow}^\gamma)^* D_{j\uparrow}^\gamma + e^{-\frac{i}{2}(\xi_k - \xi_j)} (D_{k\downarrow}^\gamma)^* D_{j\downarrow}^\gamma) = D_\mu \quad (4.19)$$

として、 $\Delta\chi$  を

$$\Delta\chi_\mu = \Delta\chi_{\mu 0} + \delta\Delta\chi_\mu \quad (4.20)$$

としてある。このうち、 $\Delta\chi_{\mu 0}$  を最初に求める。

4.0.1  $\Delta\chi_{\mu_0}$  の導出

eq. (4.20) の第二項を 0 として、eq. (4.18) 右辺の  $\sin$  を十分小さいとして近似する。

$$\sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l \frac{\partial}{\partial(\Delta\chi_{\mu_0})} \left( \sum_{\nu \in C_l} L(l, \nu) \Delta\chi_{\nu_0} \right) = D_\mu \Delta\chi_{\mu_0} \quad (4.21)$$

これを  $D_\mu$  について解いて、eq. (4.9) に代入して

$$\sum_{l'=1}^{N_c} M_{ll'} \lambda_{l'} = -2\pi w_{C_l} \quad (4.22)$$

$$M_{ll'} = \sum_{\nu \in C_l} L(l, \nu) L(l', \nu) \frac{2}{D_\nu} \quad (4.23)$$

となる<sup>\*10</sup>。この連立一次方程式を解くことで  $\lambda_l$  を導き、eq. (4.9) を用いることで  $\Delta\chi_{\mu_0}$  を導ける。

4.0.2  $\delta\Delta\chi_\mu$  の導出

次に、 $\delta\Delta\chi_\mu$  を求める。まず、eq. (4.18) を三角関数の和の公式で分解することで、

$$\sum_{l=1}^{N_c} L(l, \mu) \lambda_l = D_\mu \left( \sin \frac{\Delta\chi_{\mu_0}}{2} \cos \frac{\delta\Delta\chi_\mu}{2} + \cos \frac{\Delta\chi_{\mu_0}}{2} \sin \frac{\delta\Delta\chi_\mu}{2} \right) \quad (4.24)$$

が得られる。ここで、 $\delta\Delta\chi_\mu$  は  $\Delta\chi_\mu$  に比べて十分小さいとすると

$$\sum_{\mu \in C_l} L(l, \mu) \delta\Delta\chi_\mu = 0 \quad (4.25)$$

であるから、 $\gamma \in C_l$  について  $L(l, \gamma)$  をかけて和をとり、

$$\sum_{l'=1}^{N_c} N_{ll'} \lambda_{l'} = \sum_{\mu \in C_l} 2 \tan \frac{\Delta\chi_{\mu_0}}{2} L(l, \mu) \quad (4.26)$$

$$N_{ll'} = \sum_{\mu \in C_l} \frac{1}{\cos \frac{\Delta\chi_\mu}{2}} D_\mu^{-1} L(l, \mu) L(l', \mu) \quad (4.27)$$

を得られる。この連立一次方程式を解くことで  $\lambda_l$  を導き、eq. (4.24) に代入することで  $\delta\Delta\chi_\mu$  が導ける。こうして求めた一電子波動関数のうち、占有されている下半分の準位だけを用いて系の波動関数がスレー

<sup>\*10</sup>  $\sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l \frac{\partial}{\partial(\Delta\chi_{\mu_0})} \left( \sum_{\nu \in C_l} L(l, \nu) \Delta\chi_{\nu_0} \right) = \sum_{l=1}^{N_c} L(l, \mu) \lambda_l$

ター行列式の形で求まる。これは、電子状態とスピンの角度  $\xi$ 、ホールの位置によって決まる系の構造因子と、 $\chi$  によって決まる位相因子に分けて、 $\chi$  の巻き数によって定められる電流の状態を  $p$  として、

$$\Psi^p(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \Psi_0^p(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) e^{-i\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \chi(\mathbf{r}_\alpha)} \quad (4.28)$$

と表すことができる。外部から電流を流し込む場合の  $\chi$  とスピン渦誘起ループ電流も同様にして求めることができる。外部電流を系に隣接するループと考えて、eq. 4.12 を

$$I = E[\Delta\chi] + \sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l (2\pi w_{C_l} - \sum_{v \in C_l} L(l, v) \Delta\chi_v) - \sum_{l'=1}^{N_c^{ext}} \lambda_{l'}^{ext} L(l', \gamma) \delta\chi_\gamma \quad (4.29)$$

とする。ここで、 $\lambda_{l'}^{ext} = J_{ext}/2$  である。 $J_{ext}$  の値は任意に決めていい外部から流しこむ電流の密度である。電流はこれによって

$$J = -\frac{2e}{\hbar} \sum_{l=1}^{N_c} \lambda_l \frac{\delta}{\delta \nabla \chi} \left( \sum_{C_l} L(l, \gamma) \Delta\chi_\gamma \right) - \frac{2e}{\hbar} \sum_{l'=1}^{N_c^{ext}} \lambda_{l'}^{ext} \frac{\delta}{\delta \nabla \chi} \left( \sum_{\gamma \in C_{l'}} L(l', \gamma) \Delta\chi_\gamma \right) \quad (4.30)$$

となるので、eq.4.23 は

$$\sum_{l'=1}^{N_c} M_{ll'} \lambda_{l'} = -2\pi w_{C_l} - \sum_{l''=1}^{N_c^{ext}} \sum_{k \leftarrow j} \frac{2}{D_{kj}} L(l, \gamma) L(l'', \gamma) \lambda_{l'}^{ext} \quad (4.31)$$

$$M_{ll'} = \sum_{v \in C_l} L(l, v) L(l', v) \frac{2}{D_v} \quad (4.32)$$

また、eq.4.27 は

$$\sum_{l'=1}^{N_c} N_{ll'} \lambda_{l'} = \sum_{\mu \in C_l} 2 \tan \frac{\Delta\chi_{\mu 0}}{2} L(l, \mu) - \sum_{l''=1}^{N_c^{ext}} \sum_{k \leftarrow j} \frac{2}{D_{kj} \cos \frac{\Delta\chi_{kj}^0}{2}} L(l, \gamma) L(l'', \gamma) \lambda_{l'}^{ext} \quad (4.33)$$

$$N_{ll'} = \sum_{\mu \in C_l} \frac{1}{\cos \frac{\Delta\chi_\mu}{2}} D_\mu^{-1} L(l, \mu) L(l', \mu) \quad (4.34)$$

と書き換えられる。そうして、波動関数は

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \prod_{a=1}^{2N_e} c^\dagger(\phi_a) |vac\rangle \quad (4.35)$$

$$c^\dagger(\phi_a) |vac\rangle = \sum_{j=1}^N e^{-i\frac{\chi_j}{2}} (e^{-i\frac{\xi_j}{2}} D_{j\uparrow}^a c_{j\uparrow}^\dagger + e^{i\frac{\xi_j}{2}} D_{j\downarrow}^a c_{j\downarrow}^\dagger) |vac\rangle \quad (4.36)$$

と。 $\chi$  の違う状態を単一あるいは複数量子ビットの状態に見立てて量子計算を行う [1]。しかし、上の波動関数は異なる  $\chi$  の巻き数に対して直交ではない。外部磁場とスピン渦誘起ループ電流の相互作用項は

$$H_B = - \sum_{\langle k, j \rangle_1} \int_{r_j}^{r_k} A^{\text{em}}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \hat{j}_{k \leftarrow j}, \quad (4.37)$$

となる。ここで、 $r_j$  は  $j$  番目のサイトを表す。 $A^{\text{em}}$  は外部磁場のベクトルポテンシャルである。しかし、 $\text{CuO}_2$  平面上のスピン渦を最適化する手法はまだ精度がいいとは言えない。 $\chi$  の巻き数がある状態とそれに対して全て逆の状態のエネルギー準位が磁場を印加しなくても縮退しないからである。本来、磁場を印加しなければ縮退している。なので、電流の情報を含む項のみを用いて直交する波動関数を求める。そうすると

$$\langle \Phi_i | H_B | \Phi_i \rangle = \epsilon_i \quad (4.38)$$

$$H_B | \Phi_i \rangle = \epsilon_i | \Phi_i \rangle \quad (4.39)$$

であったものは

$$H_K + H_U + H_B = H_0 \quad (4.40)$$

$$\langle \Phi_i | H_0 | \Phi_i \rangle = E_{\text{CuO}_2}^i + \epsilon_i = E_i \quad (4.41)$$

$$H_0 | \Phi_i \rangle = E_i | \Phi_i \rangle \quad (4.42)$$

$$H_0 \approx \sum_i^{N_s} \epsilon_i | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | \quad (4.43)$$

となる。ここで、 $E_{\text{CuO}_2}^i$  は  $\chi$  の巻き数が逆の状態と縮退している。ここで、 $| \Phi_i \rangle$  は  $\chi$  の巻き数で規定される  $i$  番目の直交な電流状態である。こうして、スピン渦誘起ループ電流を有する系の直交する波動関数は、

$$H\mathbf{c} = S\mathbf{c}, \quad H_{ij} = \langle \tilde{\Phi}_i | H | \tilde{\Phi}_j \rangle, \quad S_{ij} = \langle \tilde{\Phi}_i | \tilde{\Phi}_j \rangle \quad (4.44)$$

を解いて、

$$| \Phi_a \rangle = \sum_{i=1}^{N_s} c_j^a | \tilde{\Phi}_i \rangle \quad (4.45)$$

と、求まる。ここで、 $N_s$  は系の電流状態の数である。また、 $| \tilde{\Phi}_i \rangle$  は 4.35 で示した  $\chi$  の巻き数で規定される  $i$  番目の非直交な電流状態である。系の状態はそれらの一次結合

$$| \Psi \rangle = \sum_{a=1}^{N_s} b_a(t) e^{-i \frac{E_a}{\hbar} t} | \Phi_a \rangle \quad (4.46)$$

で表される。この波動関数を時間発展させることで、量子計算を実行する。そして、それに使うハミルトニアンは、電氣的遷移双極子モーメントである。それについては次章で詳しく説明する。

## § 5 スピン渦誘起ループ電流の直交状態

この章では、スピン渦誘起ループ電流の直交状態を、電氣的遷移双極子モーメントとレーザーとの相互作用によって、任意の重ね合わせ状態を作る方法を SVQ の例に則って解説する。まず、Spin-Vortex-Quartet(SVQ) は、スピン渦が安定して存在する最も小さな系である。この系のスピン構造は Fig.7 のようになっている。その周りに流れる電流は、それぞれのホールにつき右回り、左回りの 2 通りなため、全部で 16 通りの電流パターンが実現する (Fig.8)。そしてそれら電流状態のエネルギー準位は Fig.6 のようになる。 $\chi$  の巻き数が同じホールを 3 つ以上有する状態のエネルギー準位はそうでない状態に比べて高くなっている。そして、それらの電流状態の間には電氣的遷移双極子モーメントが存在する。その表式は

$$\mu_{kl}^x = - \sum_j e \langle \Phi_k | (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) | \Phi_l \rangle x_j \quad (5.1)$$

$$\mu_{kl}^y = - \sum_j e \langle \Phi_k | (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) | \Phi_l \rangle y_j \quad (5.2)$$

である。遷移双極子モーメントとの相互作用ハミルトニアンは外部レーザーを  $E_0 \cos \omega t$  とすると

$$H_D = - \sum_j e (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) \mathbf{r}_j \cdot \mathbf{e} E_0 \cos \omega t \quad (5.3)$$

である。そして、その成分は eq.5.1、5.2 を用い、レーザーの入射方向を  $\mathbf{r} = (\cos \alpha, \sin \alpha, 0)$  とすると

$$\langle \Phi_k | H_D | \Phi_l \rangle = E_0 (\mu_{kl}^x \cos \alpha + \mu_{kl}^y \sin \alpha) \cos \omega t \quad (5.4)$$

と表される。SVQ の周りに流れる各電流状態間の遷移双極子モーメントを Table. 2 に示す。これを見ると、最もエネルギー準位が低い  $|LRRL\rangle$ 、 $|RLLR\rangle$  状態間の遷移双極子モーメントは全ての遷移の中で最も小さく、その  $x$  成分、 $y$  成分ともに遷移が起こりやすい電流状態はそれぞれに 2 つしかない。また、最もエネルギー準位の高い  $|LLLL\rangle$ 、 $|RRRR\rangle$  状態と他の状態との間の遷移双極子モーメントはどれも  $10^{-30}(\text{C} \cdot \text{m})$  のオーダーに収まっている。ここから、Table. 3 を見ると、 $C_2$  対称性を有する電流状態間、あるいは遷移する状態のうちどちらかにそれを含む場合、遷移双極子モーメントはそうでない状態間のものと比べて低くなる傾向があるとわかる。対して、 $C_2$  対称性を有さず、 $\sigma$  対称性を有する電流状態間あるいはどちらかにそのような状態を含む遷移の双極子モーメントは非常に大きくなる。特に  $|LLRR\rangle$ 、 $|RRLL\rangle$  状態間のものの  $x$  成分と  $|LRLR\rangle$ 、 $|RLRL\rangle$  状態間のものの  $y$  成分は非常に大きく、 $22.0 \times 10^{-30}(\text{C} \cdot \text{m})$  以上になっている。これは、

$$\rho_j^{kl} = \langle \Phi_k | (c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}) | \Phi_l \rangle \quad (5.5)$$

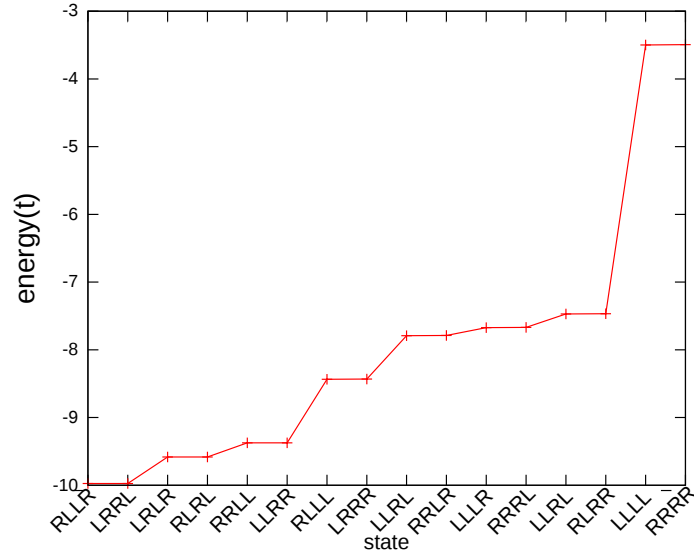


Fig. 6 SVQ のまわりに流れる各電流状態のエネルギー準位。横軸は状態。縦軸には求められた直交する波動関数  $|\Phi_a\rangle$  でハミルトニアン  $H = H_{CuO_2} + H_B$  を挟んだものを示してある。 $\chi$  の巻き数が同じホールを 3 つ以上有する電流状態のエネルギー準位はそうでないものに比べて  $t$  程度大きくなる。磁場による準位の分裂はどの状態も  $10^{-3}t$  程度である。

で表されるサイト  $j$  における遷移電荷分布からもわかる。Fig. (9) を見ると、 $|RLRL\rangle$  と  $|LRLR\rangle$  状態間の遷移電荷分布は電流の分岐点で非常に大きく、また片方が正、もう一方が負になっている。また、遷移電荷分布の山あるいは谷の間には山と谷がベッセル関数のように周期的にできる。それゆえに、これらの状態間における遷移双極子モーメントが他の遷移と比べて格段に大きくなる。また、電流の向きが変化するのはのみの点においては、遷移電荷分布はあまり大きくはならず、 $|LLLL\rangle$ 、 $|RRRR\rangle$  状態間の遷移双極子モーメントが異常に小さいのはそれ故である。他の遷移に対しても共通の傾向が見られ、また、逆の遷移に対しては遷移電荷分布も反転する。これらから、遷移電荷分布の大きさはその点における電流の流入出量と方向の変化によって決められていることがわかる。

以上から、スピン渦誘起ループ電流は電氣的遷移双極子モーメントを有するため、量子ビットとして利用可能であることが改めて確認された。私の以前の論文では、8 状態のみで計算を行ったため、遷移双極子モーメントの値の傾向は明確ではなかった [1]。この計算によって、 $C_2$  対称性を有さない電流パターンであれば、どんなものでも単一あるいは複数量子ビットとして利用可能であることが確認された。

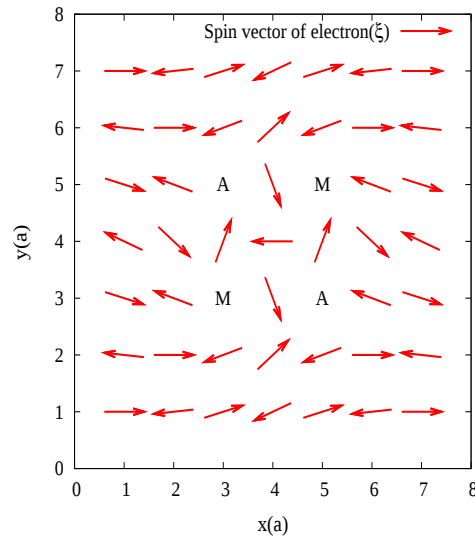


Fig. 7 SVQ における  $3d_{x^2-y^2}$  軌道上の電子のスピン期待値。M、A はそれぞれ、そのホールにおいて  $w_{Cl}[\nabla\eta]$  が +1、-1 であることを表す赤い矢印はそれぞれのサイトにおけるスピンの面内角の期待値  $\xi$  を表す。( $t = 130meV, U = 8t, a = 0.4nm$ )

Table. 2 SVQ のまわりに流れる各電流状態間の電氣的遷移双極子モーメントの  $x$  成分と  $y$  成分。単位は  $10^{-30}(C \cdot m)$ 。上三角部分は  $y$  成分、下三角部分は  $x$  成分を表す。青色で示した  $|LRLR\rangle$ 、 $|RLRL\rangle$  状態間の  $y$  成分と  $|LLRR\rangle$ 、 $|RRLL\rangle$  状態間の  $x$  成分は他の遷移に比べてかなり大きくなっている。これは、遷移する状態が共に  $C_2$  対称性を有さず、 $\sigma$  対称性を有するからだと思われる (Table. 3)。

$l$ $k$	$\mu_{kl}^x(10^{-30}C \cdot m)$															
	LL LL	LL RL	RL LL	LL LR	LR LL	RL RL	LL RR	RL LR	LR RL	RR LL	LR LR	RL RR	RR LR	RR RL	RR LR	RR RR
LL LL	0	4.601	0.07	7.767	6.288	0.415	1.902	0.222	0.133	1.417	0.605	1.727	2.174	0.045	1.293	0.085
LL RL	4.568	0	11.837	13.254	1.874	3.897	12.286	1.813	9.102	1.132	2.372	0.545	1.535	0.897	1.3	1.293
RL LL	1.839	8.572	0	1.79	13.213	6.552	5.329	1.77	1.093	5.852	6.207	1.075	0.936	0.415	0.897	0.045
LL LR	7.607	15.518	1.95	0	11.863	1.117	11.895	15.729	3.486	10.521	2.005	0.818	0.425	0.936	1.535	2.174
LR LL	6.209	2.015	15.497	8.614	0	0.227	4.297	2.956	12.946	13.67	3.016	1.043	0.818	1.075	0.545	1.727
RL RL	1.833	7.739	9.972	7.041	3.533	0	0.334	2.67	2.769	6.82	1.998	3.016	2.005	6.207	2.372	0.605
LL RR	0.794	10.173	0.511	8.268	2.318	0.501	0	8.882	8.595	22.721	6.82	13.67	10.521	5.852	1.132	1.417
RL LR	0.262	1.673	1.776	15.719	2.863	8.837	2.871	0	0.662	8.595	2.769	12.946	3.486	1.093	9.102	0.133
LR RL	0.171	9.023	1.798	3.277	12.926	8.642	2.656	0.581	0	8.882	2.67	2.956	15.729	1.77	1.813	0.222
RR LL	0.271	1.271	3.454	7.226	10.392	7.47	2.457	2.656	2.871	0	0.334	4.297	11.895	5.329	12.286	1.902
LR LR	1.488	2.173	6.407	9.15	9.357	22.2	7.47	8.642	8.837	0.501	0	0.227	1.117	6.552	3.897	0.415
RL RR	1.717	0.497	0.836	1.054	1.114	9.357	10.392	12.926	2.863	2.318	3.533	0	11.863	13.213	1.874	6.288
RR LR	2.148	1.259	0.834	0.827	1.054	9.15	7.226	3.277	15.719	8.268	7.041	8.614	0	1.79	13.254	7.767
RR RL	0.457	1.275	0.028	0.834	0.836	6.407	3.454	1.798	1.776	0.511	9.972	15.497	1.95	0	11.837	0.07
RR LR	1.273	1.316	1.275	1.259	0.497	2.173	1.271	9.023	1.673	10.173	7.739	2.015	15.518	8.572	0	4.601
RR RR	0.102	1.273	0.457	2.148	1.717	1.488	0.271	0.171	0.262	0.794	1.833	6.209	7.607	1.839	4.568	0



Table. 3 SVQ のまわりに流れる各電流状態の対称群表。対称性は、電流の形状で判別している。 $C_4$ 、 $C_2$  対称性の原点は  $(x, y) = (4, 4)$  に、 $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$  対称性における対称軸はそれぞれ  $y = 4$ 、 $x = 4$  である。

States																
$l$	LL	LL	RL	LL	LR	RL	LL	RL	LR	RR	LR	RL	RR	RR	RR	RR
$sim.$	LL	RL	LL	LR	LL	RL	RR	LR	RL	LL	LR	RR	LR	RL	LR	RR
$C_4$	○	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	×	○
$C_2$	○	×	×	×	×	×	×	○	○	×	×	×	×	×	×	○
$\sigma_x$	○	×	×	×	×	○	×	○	○	×	○	×	×	×	×	○
$\sigma_y$	○	×	×	×	×	×	○	○	○	○	×	×	×	×	×	○

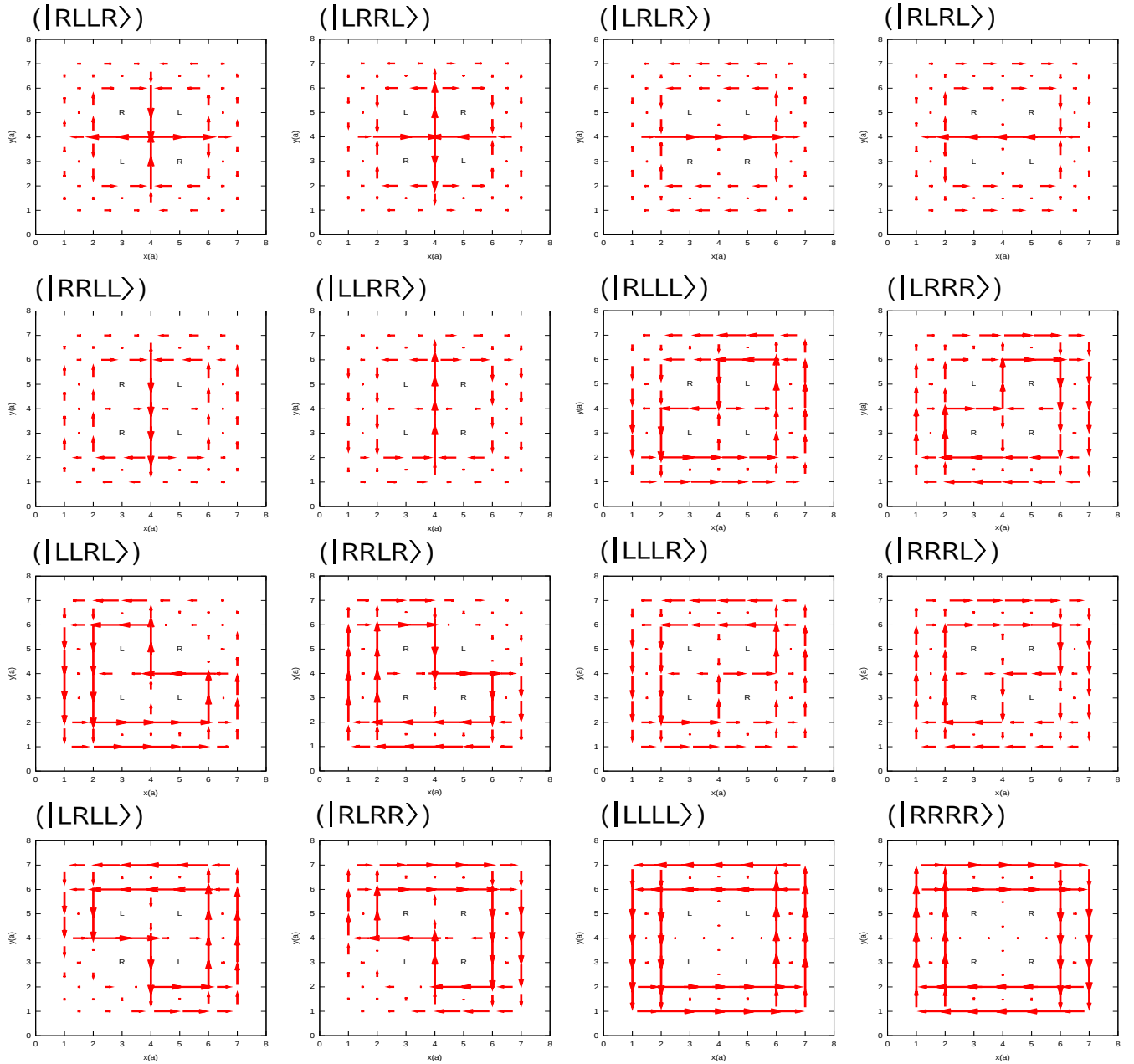


Fig. 8 SVQ における電流状態。(  $|LRRL\rangle$  )-(  $|RRRR\rangle$  ) 電流状態左から右に、上から下に行くほどエネルギー準位は上になる。 $L$ 、 $R$  はそれぞれ、そのホールにおいて  $w_{C_l}[\nabla\chi]$  が  $+1$ 、 $-1$  であることを表す。赤い矢印は各ボンド間に流れる電流の大きさと方向を表す。各電流状態の縮退は  $B = (10.8 \times 10^{15} x^2 + 1.5 \times 10^9 x, 2.7 \times 10^{15} y^2 + 1.5 \times 10^9 y, 0)$  の 2 次関数型勾配を持った磁場を印加して解いた。

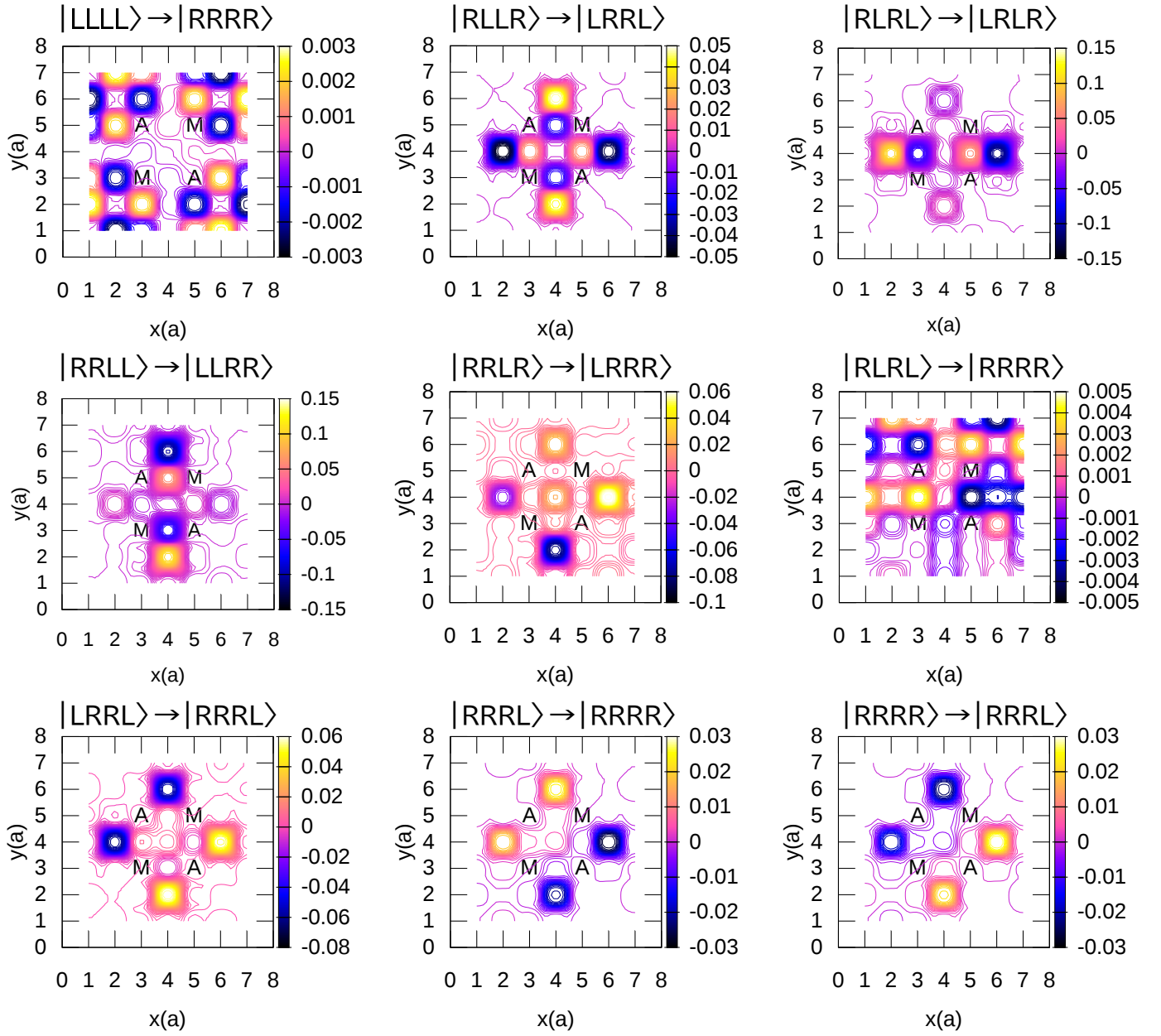


Fig. 9 Fig. (8) における各電流状態の間の遷移電荷分布の虚数成分を各サイトごとにプロットして 2 次元的に示したものの。遷移電荷分布の大きさは等高線で示してある。各々のプロットの右側のカラーボックスはそれぞれのプロットにおける遷移電荷分布の値を示したものである。各電流状態の縮退は  $B = (10.8 \times 10^{15}x^2 + 1.5 \times 10^9x, 2.7 \times 10^{15}y^2 + 1.5 \times 10^9y, 0)$  の 2 次関数型勾配を持った磁場を印加して解いた。

## § 6 量子計算とそのシミュレーション

この章では、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして、量子計算の方法を論じる。前章で、スピン渦誘起ループ電流が遷移双極子モーメントを有することが明らかになった。それを踏まえて、この章では結合した 2 量子ビット系における遷移双極子モーメントと、エネルギーを論じ、スピン渦誘起ループ電流量子ビットにおける単一ゲート演算と 2 ビットの制御演算ゲートの実装法と、それを用いて Grover の検索アルゴリズムを計算機上でシミュレーションした結果を示す。まず、時間発展する状態の波動関数は eq.(4.46) で表される。これのハミルトニアンに遷移双極子相互作用のハミルトニアンを加え、シュレディンガー方程式を元に  $b(t)$  について 1 次の連立微分方程式を組む。そうして  $b_i(t)$  は

$$i\hbar \dot{b}_k(t) = \sum_j M_{kj}(t) b_j(t) \quad (6.1)$$

と表される。ここで、 $M_{kj}(t)$  は

$$M_{kj}(t) = \mathcal{E}_0 \mu_{kj}^y \cos(\omega t + \phi) \exp(i\omega_{jk}t), \quad \omega_{jk} = \frac{E_j - E_k}{\hbar} \quad (6.2)$$

と表される。本研究では、量子ビットの状態間にラビ振動を起こさせるのに、 $y$  軸方向にレーザーを照射する。従って、遷移双極子モーメントは  $y$  成分を使用する。この、eq. (6.1) は Chebychev 展開の方法で解くことができる [35]。そして、これを解くことは、存在確率を示すベクトル  $b(0)$  に対して時間発展演算子  $P$  を作用させ、 $t = t_1$  まで時間発展させることに相当する。この演算子は、

$$\mathbf{b}(t_1) = P\mathbf{b}(0), \quad (6.3)$$

$$P = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_1} M(t') dt'\right]. \quad (6.4)$$

と表される。状態  $|\Phi_\ell\rangle$  と  $|\Phi_k\rangle$  の準位差に相当する角振動数  $\omega_{\ell k} \geq 0$ 、強さ  $\mathcal{E}$  の電磁波を照射することでラビ振動をそれらの状態間に起こさせることが可能なのだ。その場合の時間発展演算子の行列表現は

$$P^{k\ell}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \frac{\mu_{k\ell}}{|\mu_{k\ell}|} e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \frac{\mu_{\ell k}^*}{|\mu_{\ell k}|} e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

と表される。ここで、

$$\theta = \frac{2\pi}{T_{k\ell}} t_1 \quad (6.6)$$

である。また、 $T_{k\ell}$  はラビ振動の周期であり

$$T_{k\ell} = \frac{h}{|\mu_{k\ell}^y| \mathcal{E}_0}. \quad (6.7)$$

と表される。計算結果から、遷移双極子モーメントは純虚数であることがわかっているため、 $\mu_{k\ell}^y / |\mu_{k\ell}^y|$  は  $-i$  あるいは  $i$  とした。つまり、時間発展演算子  $P_{k\ell}$  はブロッホ球面上の移動演算子と全く同じ形になる。すなわち、レーザーの照射時間と位相を制御することで、任意の重ね合わせが実現する。単一量子ビットとして、Fig. 10 の系を使用する。SVQ を 4 つ正方形に配置し、その周りに流れる電流のうち、右に触れた振子子の形を  $|R_s\rangle$ 、左に触れた振子子の形を  $|L_s\rangle$  とする。そしてこれらを量子ビットの 0 と 1 に見立てる。これを Pendulum-Like-Current-Qubit (PLCQ) と呼称する。これを同一の  $\text{CuO}_2$  平面に 2 つ配置し、 $|L_s L_s\rangle$ 、 $|R_s R_s\rangle$  状態は中心に対して  $C_2$  対称に配置し、 $|R_s L_s\rangle$ 、 $|L_s R_s\rangle$  は  $x = 13$  に対して  $\sigma_x$  対称に配置する。これらを量子ビットの状態に見立て、 $|R_s R_s\rangle = |00\rangle$ 、 $|R_s L_s\rangle = |01\rangle$ 、 $|L_s R_s\rangle = |10\rangle$ 、 $|L_s L_s\rangle = |11\rangle$  とする (Fig. 11)。そしてこれらを状態確率ベクトル  $\mathbf{b}$  の各成分  $\mathbf{b} = (b_0, b_1, b_2, b_3)$  の値にそれぞれ対応させる。これら 4 状態のエネルギー準位を Fig. 12 に示す。準位の分裂は量子ビットとして利用するには十分な値である。また、遷移双極子モーメントを Table. 4 に示す。単一量子ビットの遷移に相当する遷移双極子モーメントの  $y$  成分は非常に大きく、 $6.5 \times 10^{-30} (\text{C} \cdot \text{m})$  以上になる。これは、水素原子の  $1s$ 、 $2p$  軌道間のものより大きくなっている。また、この章では量子ビットが結合した系における計算を行うため 2 量子ビットの同時遷移に対応する遷移双極子モーメントも大きくなければならないが、 $|L_s R_s\rangle$  状態と  $|R_s L_s\rangle$  状態間の遷移双極子モーメントは  $1.02 \times 10^{-30} (\text{C} \cdot \text{m})$  と、単一量子ビットの遷移に相当するものと比較しても 1/5 程度なため、量子計算はこの系で十分可能である。

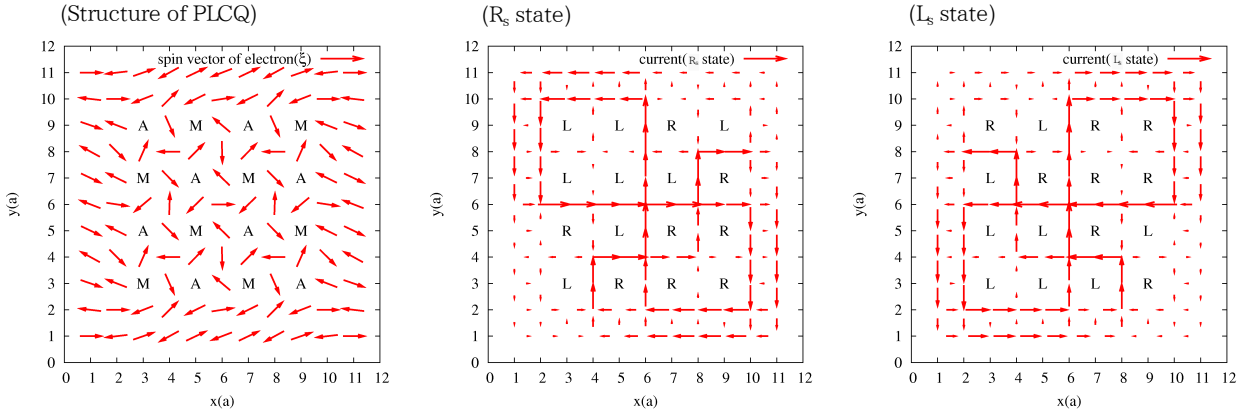


Fig. 10 単一 PLCQ 系におけるスピン構造と、電流パターン。(左) スピン構造。赤い矢印はスピンの面内角を表す。M と A は  $w_{C_l}[\nabla \xi] = 1$  と  $w_{C_l}[\nabla \xi] = -1$  にそれぞれ対応する。(中央)  $|R_s\rangle$  状態の電流パターン。(右)  $|L_s\rangle$  状態の電流パターン。

この系において、左手側の量子ビットの演算に相当する行列  $R_1(\theta, \phi)$  は

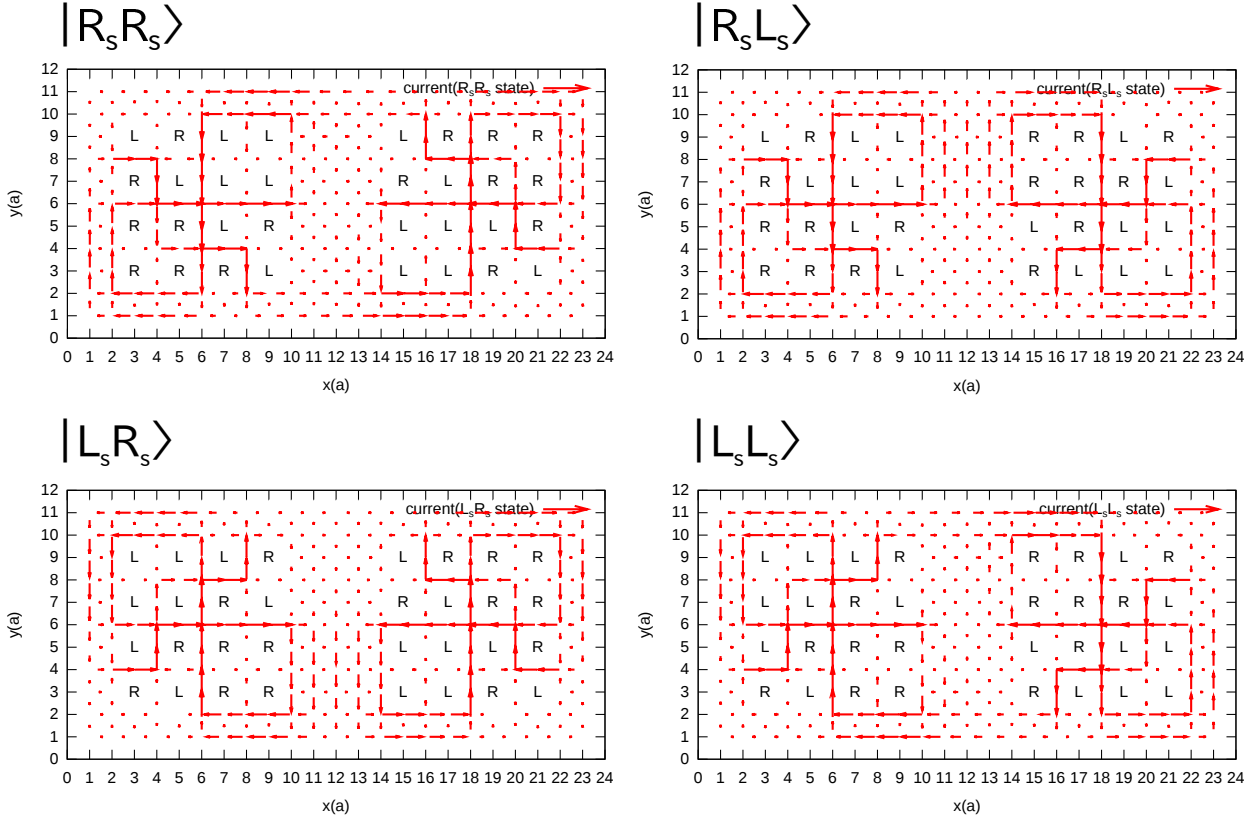


Fig. 11 PLCQ2 量子ビット系の電流状態。左上から右下にそれぞれ  $|R_S R_S\rangle = |00\rangle$ 、 $|R_S L_S\rangle = |01\rangle$ 、 $|L_S R_S\rangle = |10\rangle$ 、 $|L_S L_S\rangle = |11\rangle$  である。系の大きさは  $24a \times 10a$  とした。

Table. 4 PLCQ2 量子ビット系における遷移双極子モーメントとラビ周期。

k	l	$\mu_{kl}^y (10^{-30} \text{C} \cdot \text{m})$	Rabi period(ns)	$\mu_{kl}^x (10^{-30} \text{C} \cdot \text{m})$	Rabi period (ns)
$ R_S L_S\rangle$	$ L_S R_S\rangle$	1.211	5.472	0	$1.497 \times 10^{10}$
$ R_S L_S\rangle$	$ R_S R_S\rangle$	6.873	0.964	0.049	134.298
$ R_S L_S\rangle$	$ L_S L_S\rangle$	6.87	0.965	0.049	134.298
$ L_S R_S\rangle$	$ R_S R_S\rangle$	6.87	0.965	0.049	134.298
$ L_S R_S\rangle$	$ L_S L_S\rangle$	6.873	0.964	0.049	134.298
$ R_S R_S\rangle$	$ L_S L_S\rangle$	0.044	152.293	0	$3.346 \times 10^8$

$$R(\theta, \phi)_1 = \begin{pmatrix} P^{13}(\theta, \epsilon^{13}\phi)_{11} & 0 & P^{13}(\theta, \epsilon^{13}\phi)_{12} & 0 \\ 0 & P^{24}(\theta, \epsilon^{24}\phi)_{11} & 0 & P^{24}(\theta, \epsilon^{24}\phi)_{12} \\ P^{13}(\theta, \epsilon^{13}\phi)_{21} & 0 & P^{13}(\theta, \epsilon^{13}\phi)_{22} & 0 \\ 0 & P^{24}(\theta, \epsilon^{24}\phi)_{21} & 0 & P^{24}(\theta, \epsilon^{24}\phi)_{22} \end{pmatrix}, \quad (6.8)$$

であり、右手側の量子ビットにおける演算  $R_2(\theta, \phi)$  は

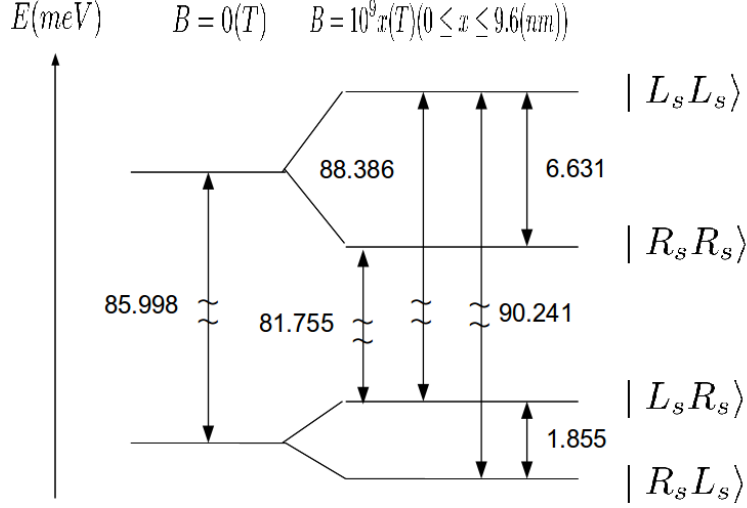


Fig. 12 PLCQ2 量子ビット系におけるエネルギー準位。

$$R(\theta, \phi)_2 = \begin{pmatrix} P^{12}(\theta, \epsilon^{12}\phi)_{11} & P^{12}(\theta, \epsilon^{12}\phi)_{12} & 0 & 0 \\ P^{12}(\theta, \epsilon^{12}\phi)_{21} & P^{12}(\theta, \epsilon^{22}\phi)_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P^{34}(\theta, \epsilon^{34}\phi)_{11} & P^{34}(\theta, \epsilon^{34}\phi)_{12} \\ 0 & 0 & P^{34}(\theta, \epsilon^{34}\phi)_{21} & P^{34}(\theta, \epsilon^{34}\phi)_{22} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

と表される。ここで、 $\epsilon_{jk}$  は、

$$\epsilon^{jk} = \begin{cases} +1 & \text{Im}(\mu_{jk}) > 0 \\ -1 & \text{Im}(\mu_{jk}) < 0 \end{cases} \quad (6.10)$$

を満たす。 $j$  番目の量子ビットに対する  $x$  軸周りに角度  $\theta$  だけ回転する演算は

$$R_{jx}(\theta) = -iR(\theta, \frac{\pi}{2})_j \quad (6.11)$$

、 $z$  軸の周りに回転する演算は

$$R_{jz}(\theta) = H_j^\dagger R_{jx}(\theta) H_j \quad (6.12)$$

である。 $H_j$  を  $j$  番目の量子ビットに対する Walsh-Hadamard ゲートとすると、単一量子ビットのパウリゲートと Walsh-Hadamard ゲートは、

$$X_j = -iR(\pi, \frac{\pi}{2})_j, \quad Y_j = -iR(\pi, -\pi)_j, \quad Z_j = H_j^\dagger X_j H_j, \quad H_j = -R(\frac{3\pi}{2}, 0)_j \quad (6.13)$$

と表される。制御 NOT(CNOT、CX) ゲート等の 2 量子ビットゲートも同様に、 $4 \times 4$  の行列で表される。これらは Fig. 13 に示した。ただし、 $R_1$  と  $R_2$  は相対位相を変えてしまう。2 量子ビットゲートでは、それぞれの量子ビットにおけるそれを合わせなければならない。

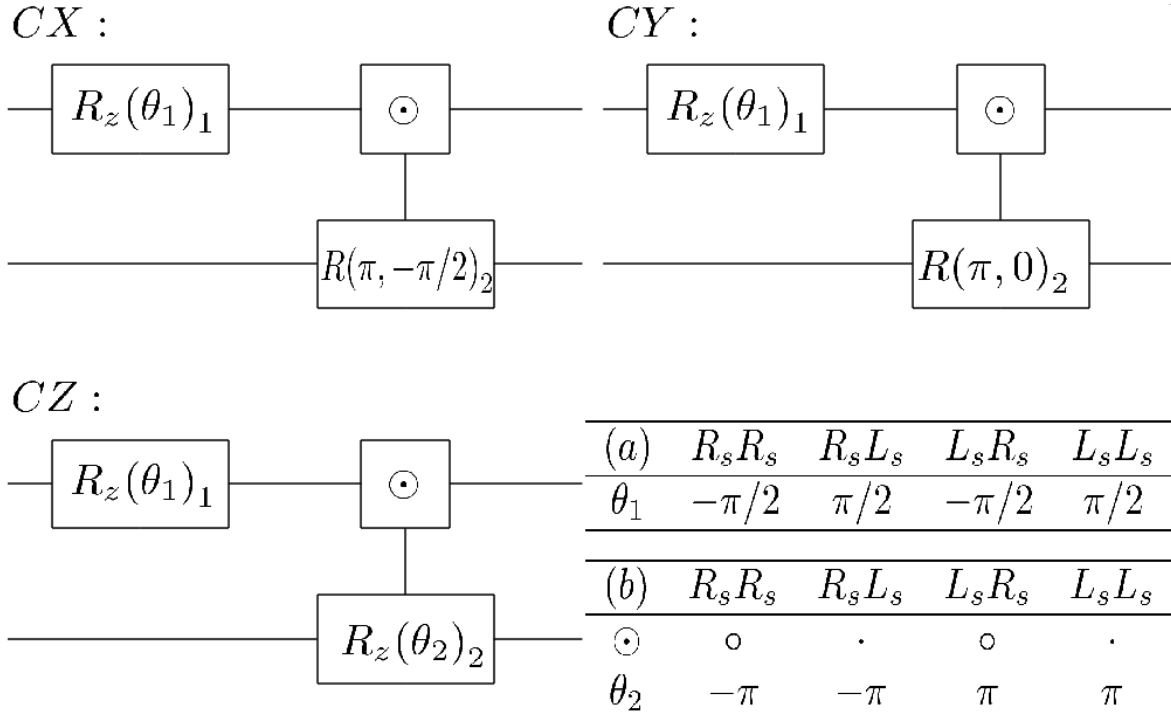


Fig. 13 制御 NOT、CY、CZ ゲート、を実現する量子回路。表 (a) は  $R_z$  ゲートにおける回転と標的とする状態の対応表。(b) はゲートと制御ゲートの演算の間の対応表。(‘ $\cdot$ ’ は制御ゲートが 1 なら、‘ $\circ$ ’ は制御ゲートが 0 なら制御演算を実行するという意味である。)

その他のゲート演算も  $R(\theta, \phi)$  の組み合わせで実現する。しかしながら、2 つの量子ビットが結合しているため、単一量子ビットの演算でさえも相対位相の調節が要求される。この問題を解決するためには、それぞれの量子ビットを独立させ、その間の結合を制御する技術が必要になる。これについては後の章で解説する。

## § 7 Grover の検索アルゴリズムのシミュレーション

この章では、前章の結果を踏まえて、Grover の検索アルゴリズムを計算機上でシミュレーションする方法を解説し、その結果について論じる。まず、Grover の検索アルゴリズムは、量子重ね合わせを用いて無作為に並んだデータに対して高速で検索を行うアルゴリズムである [36]。例えば、電話帳からある番号を名前を頼りに検索するならば、辞書順に並んでいるので検索範囲を絞ってすぐに見つけられるだろう。しかし、電話番号から名前を検索するならば、電話帳の全ての項目を逐一調べなければならない。古典コン



コンピューターで無作為に並んだデータを検索する場合も同様に、データ数  $N$  に対して最悪の場合  $N$  回の検索を要する。しかし、Grover の検索アルゴリズムであれば、 $\sqrt{N}$  回の検索で目的のデータを見つけることができる。このアルゴリズムの主な流れは、目的の状態のみ位相を逆にして、その存在確率のみを増幅し、他の状態の存在確率を小さくするというものである。このアルゴリズムは  $N$  個のデータに対して状態基底を  $|x\rangle = |0\rangle$  から  $|x\rangle = |N-1\rangle$  までをとって行う。目的の状態の位相を逆転させるにはオラクル演算子を用いる。これは、目的の状態  $|x\rangle$  に対して  $x$  が目的の状態なら 1、そうでなければ 0 になる関数  $f(x)$  をもちいて

$$|x\rangle|q\rangle \rightarrow |x\rangle|q \oplus f(x)\rangle \quad (7.1)$$

の形で表される。一般的にオラクルはオラクルビットであり、その状態は  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  となっている。すなわち、eq. (7.1) の演算は、

$$|x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow (-1)^{f(x)}|x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (7.2)$$

と表される。今回は、2 つの量子ビットが結合しているため、イオン・トラップを用いた 2 量子ビット系における方法を用いる [37]。オラクルは前章の  $U(z_0)$  ゲートを用いて実現することができる。eq. (7.2) の代わりに、

$$U(z_0)|x\rangle = \begin{cases} -|x\rangle, & x = z_0 \\ |x\rangle, & x \neq z_0, \end{cases} \quad (7.3)$$

で表される。これは

$$U(z_0) = I - 2|z_0\rangle\langle z_0|, \quad (7.4)$$

とも表される。ここで、 $I$  は単位行列である。このアルゴリズムにはもうひとつ、グローバー演算子  $U(\psi)$  が必要である。その形は、

$$U(\psi) = I - |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (7.5)$$

である。ここで、状態  $|\psi\rangle$  は

$$|\psi\rangle = H^{\otimes n}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \quad (7.6)$$

である。グローバー演算子はそれらの積

$$U(G) = U(\psi)U(z_0). \quad (7.7)$$

になる。すなわち、グローバー演算子は目的の状態の存在確率を増幅し、それ以外の状態の存在確率を小さくする演算子である。ここからは、PLCQ2 量子ビット系を用いて、Grover の検索アルゴリズムを計算機上でシミュレーションする。この場合、 $N = 4$  となるため、グローバー演算子を一度作用させるだけで目的の状態が求まる。Fig. 14 にその量子プログラムを示す。オラクルは CZ ゲートを用いて実現する。そしてその結果を、Fig. 15 に示す。 $U(\psi)$  を実現するには、 $R(\pi/2, \pi/2)$  をそれぞれの量子ビットにかけ、更に Mølmer-Sørensen ゲートをかけることで実現する。これは 2 量子ビットゲートの一種で、

$$G_{MS} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

と表される。

この章の結果から、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして、量子計算が可能であることが確認された。更に、その単一ゲート処理時間は非常に短くできると確認された。Di-Veocenzo の条件のうち、3, の半分は達成された。しかし、この計算では 2 つの量子ビットが結合している。実用的な量子コンピューターを実現させるためには、DiVincenzo の条件のうち 3, でも示されたように、量子ビットは独立かつその間の結合は制御できなければならない。次の章で 2 つの量子ビットを独立にするにはどれぐらい距離を置けばよいかを明らかにし、更に § 9 章では 2 つの量子ビット間の結合を制御する方法を論じる。

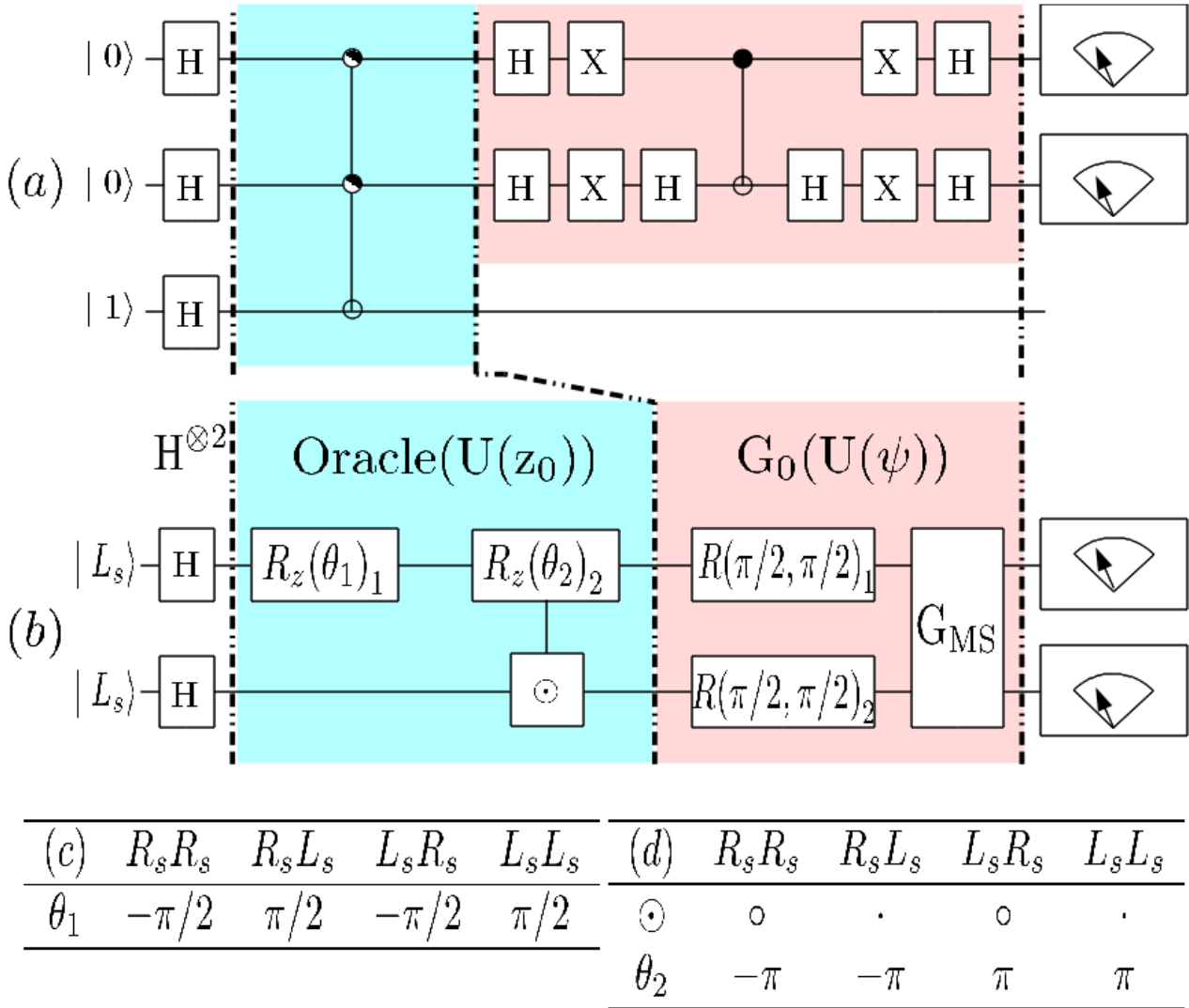


Fig. 14  $N = 4$  の系における Grover の検索アルゴリズムを実装する量子プログラム。(a) 理論上の量子プログラム。オラクルは一番下のオラクルビットを用いて実現している。(b) シミュレーションした量子プログラム。 $U(z_0)$  は CZ ゲートと単一量子ビットに対する  $Z$  ゲートで実現する。 $U(\psi)$  は  $R(\pi/2, \pi/2)$  をそれぞれの量子ビットに掛け、Mølmer-Sørensen ゲートで実現する。 $|R_s\rangle$ 、 $|L_s\rangle$  はそれぞれ量子ビットの  $|0\rangle$  と  $|1\rangle$  に対応する。(c)(b) の量子プログラムにおける最初の  $R_z(\theta_1)_1$  における検索する対象となる状態と回転させる角度  $\theta_1$  の対応表。(d)(a) における CZ ゲート  $R_z(\theta_2)_2$  における検索する対象と処理の対応表。'•' は制御ビットが  $|1\rangle$  の場合に、'◦' は  $|0\rangle$  の場合に演算を実行することを表す。

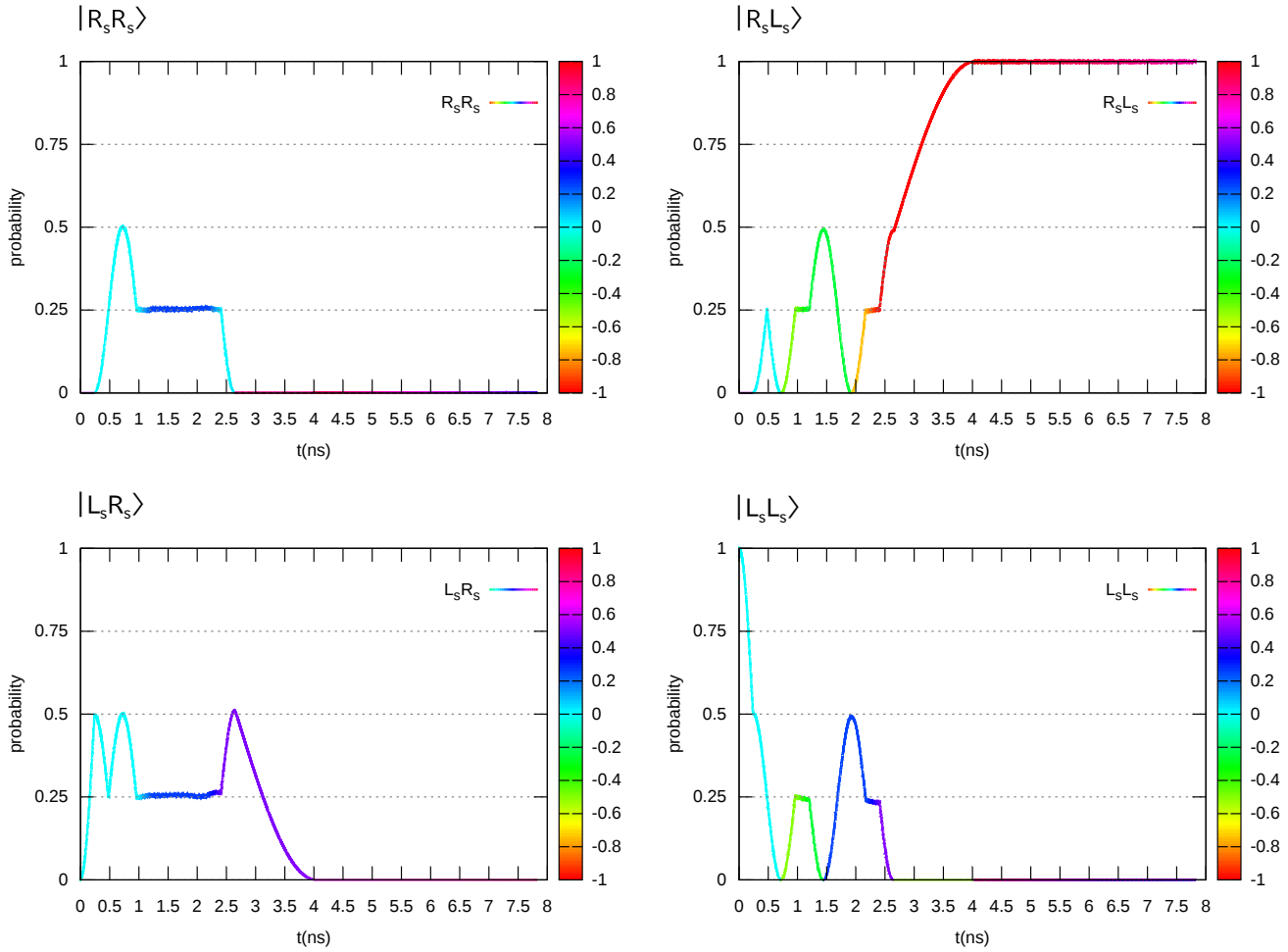


Fig. 15 Grover の検索アルゴリズムの計算機上におけるシミュレーション結果。  $|L_s R_s\rangle$  状態を検索対象とした。4 つの図はそれぞれの状態における経過時間 (ns) と存在確率についてのものである。照射する電磁波の強さ  $\mathcal{E}_0$  は  $t < 2.65$  ns の範囲では  $10^5$  V/m、  $t > 2.65$  ns の範囲では  $10^6$  V/m とした。これは、Mølmer-Sørensen ゲート処理に相当する遷移双極子モーメントが他の遷移に比べて非常に小さいため、ゲート処理時間の短縮を測るためこのようにした。各状態の位相はグラフの色で表した (1 と  $-1$  はそれぞれ  $\pi$  と  $-\pi$  を表す。)Walsh-Hadamard ゲートによる全ての状態確率の均一化は 0.48 ns に終了し。オラクル演算は 2.17 ns に終了する。Mølmer-Sørensen ゲートは 2.65 ns から処理を始める。

## § 8 量子ビット結合エネルギー

以前の論文と、修士論文では、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして量子計算が可能であることが示されたが、単一量子ビットに相当する電流同士は結合し、各量子ビットを独立化して量子計算を行うことができなかった。この章では、Spin-Vortex-Quartet(SVQ)の周りに流れる電流を単一量子ビットとして、2量子ビット間の結合を議論する。まず、Fig. 16のように $44a \times 6a$ の系を用意し、2つのSVQを $x$ 軸方向の中心に対して $\sigma$ 対称性を持って配置し、それらを均等に離しながらエネルギーを計算する。この時、例えば、左側のSVQの周りに流れる電流が $|l\rangle$ 、右側のSVQに流れる電流を $|+\rangle$ とする。これと $\chi$ の巻き数が逆の電流を $|-\rangle$ とする。この時、電流状態 $l$ に対する電流状態 $+$ の結合エネルギーは $E_{|l+\rangle} - E_{|l-\rangle} = V_{+-}^l$ で表される。ここで、Fig. 8における各電流状態をエネルギーの低い順に $|LRRL\rangle - |RRRR\rangle = (a) - (o)$ とする。この中から、状態間の遷移双極子モーメントが最も大きい(c)-(f)と、それが最も低い(a)、(b)、(n)、(o)状態について結合エネルギーを調べた。Fig. 17を見ると、 $C_2$ 対称性を持った電流状態に対しては、エネルギー準位が大きければ大きいほど、結合エネルギーも大きくなるのがわかる。特に $V_{no}^n$ はSVQの中心同士が $36(a)$ 以上離れないと $10^{-5}t$ 以下にならない。しかし、系の中心に最も近いサイトにおける電流の分岐方向が異なる場合は、結合エネルギーが安定しない。これは、SVQが同じ $y$ 座標に存在するので、エネルギーだけでは結合の強さを定義できなくなるためであると思われる。 $e$ 状態と $f$ 状態の間の結合エネルギーは $r_x = 28(a)$ で無視できる値になる。従って、 $44a \times 6a$ の $\text{CuO}_2$ 平面上であれば十分に独立した2つの単一量子ビットとして利用できることが確認された。

$\text{CuO}_2$ 面のCu原子を一部別な原子に置換し、 $t$ を低くすることで、電流を弱めることで結合エネルギーを小さくすることができる。本来ならば、原子を置換するのでJahn-Teller効果による格子のひずみも考慮に入れなければならないのであるが、簡単のため置換された原子のサイトを含むパスに対して $t$ を別な値 $t'$ にして、そのサイトの $U$ も値を変え、 $U'$ とする。これをバリア原子あるいは障壁原子と呼称する。Fig. 18の系において、同様にして結合エネルギーを計算したところ、銅原子を置換されていない系と比較すると結合エネルギーは1桁下がった(Fig. 19)。

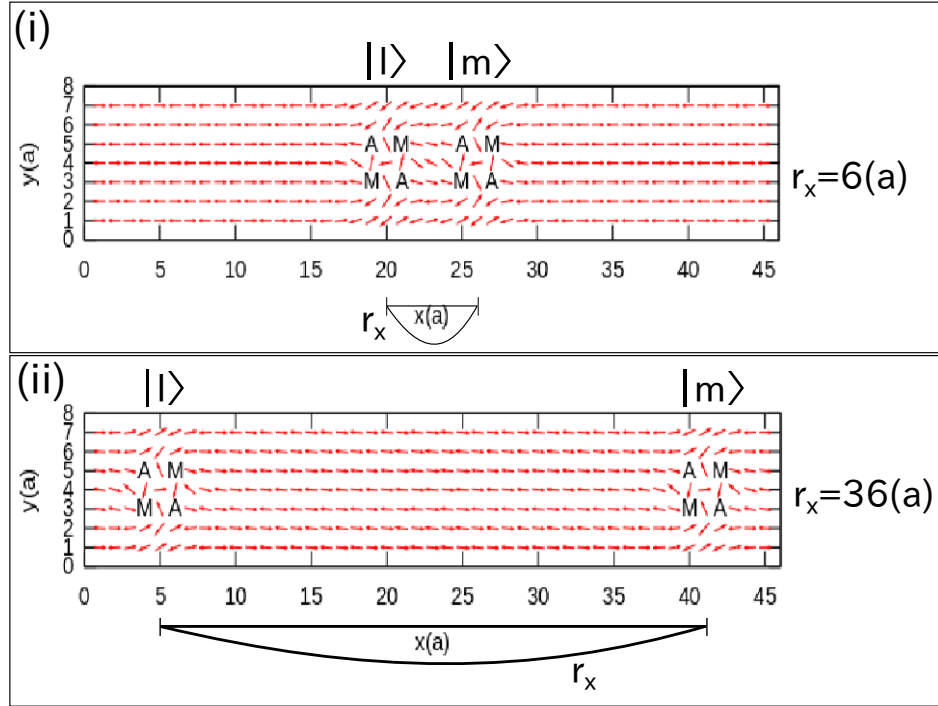


Fig. 16  $44a \times 6a$  の系に 2 つの SVQ を  $r_x = 23(a)$  に対して  $\sigma$  対称性を持つように配置し、均等に離しながら Fig. 8 の各電流状態間における  $V_{+-}^I$  を計算する。(i)  $r_x = 6(a)$  の場合のスピ構造。(ii)  $r_x = 36(a)$  の場合のスピ構造。

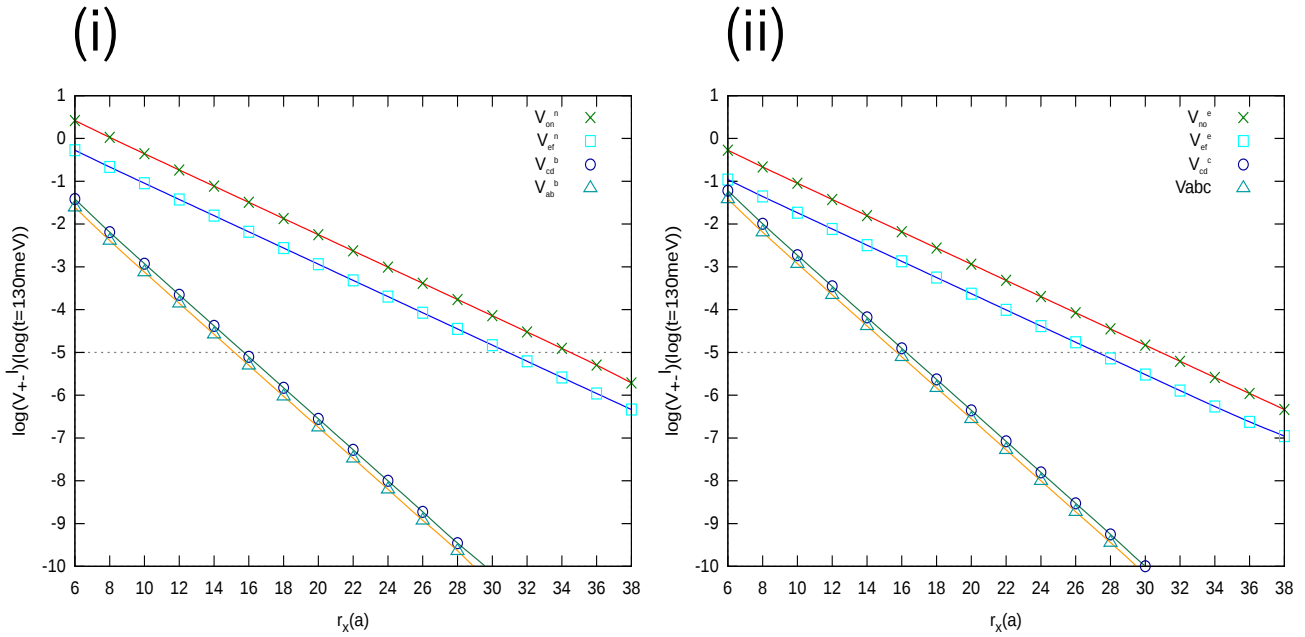


Fig. 17 Fig. 8 における電流状態間の結合エネルギー。縦軸は結合エネルギーの常用対数を、横軸は SVQ の中心間の距離を表す。 $V_{+-}^l \leq -5$  の場合、2 つの電流パターン間に結合は無いとみなす (ドット線の下側)。(i)  $C_2$  対称性を持つ電流パターンとの結合エネルギー。 $|n\rangle$  状態に対して結合エネルギーは右の電流パターンにかかわらず左の電流パターンが他のどれである場合よりも大きくなっている。特に  $V_{no}^n$  は  $36(a)$  以上離さないと無視できる値にはならない。(ii)  $\sigma$  対称性を有する電流パターンとの結合エネルギー。 $V_{ef}^e$  は  $r_x = 28(a)$  で無視できるほど小さくなる。

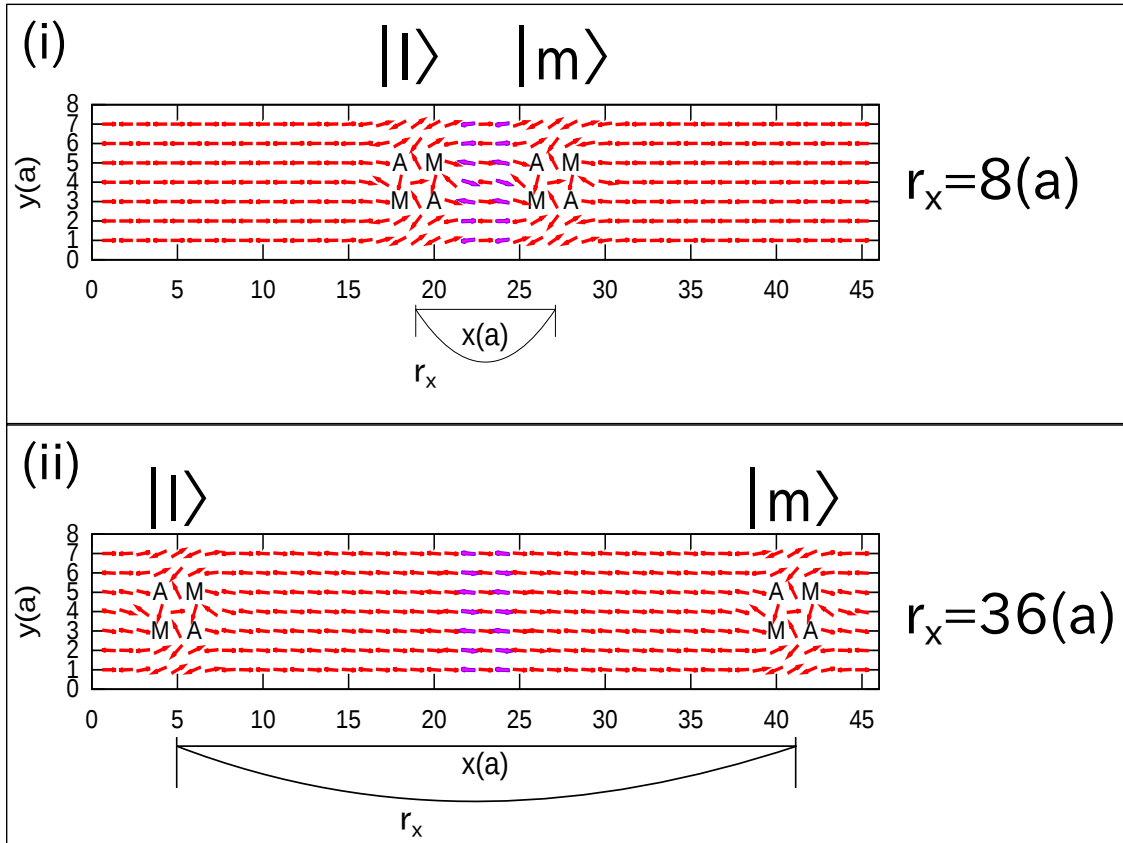


Fig. 18  $44a \times 6a$  の系に 2 つの SVQ を  $r_x = 23(a)$  に対して  $\sigma$  対称性を持つように配置し、均等に離しながら Fig. 8 の各電流状態間における  $V_{+-}^I$  を計算する。 $r_x = 22(a)$  と  $r_x = 24(a)$  において原子を置換してある。このサイトを含むパスに対して  $t' = 0.5t$ 、 $U' = 1.25U$  としてある。(i)  $r_x = 6(a)$  の場合のスピン構造。(ii)  $r_x = 36(a)$  の場合のスピン構造。



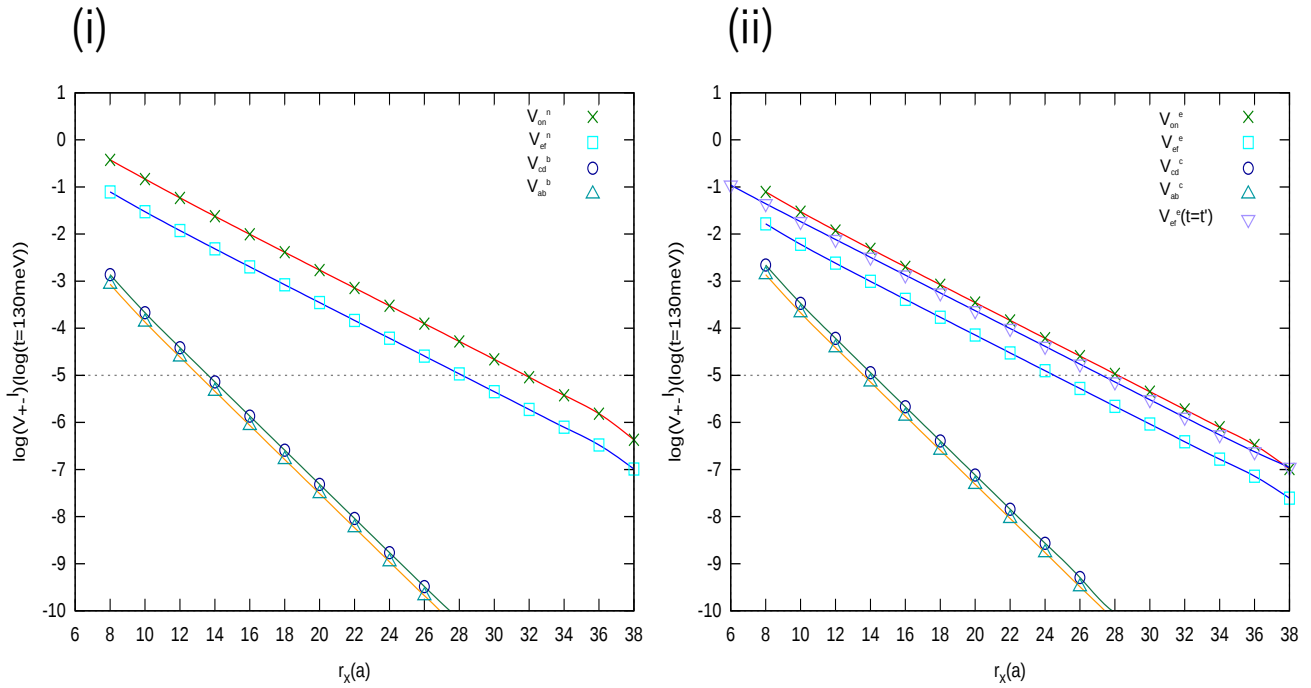


Fig. 19 Fig. 8 における電流状態間の結合エネルギー。縦軸は結合エネルギーの常用対数を、横軸はSVQ の中心間の距離を表す。  $V_{+-}^l \leq -5$  の場合、2 つの電流パターンの間には結合は無いとみなす (ドット線の下側)。(i)  $C_2$  対称性を持つ電流パターンとの結合エネルギー。  $|n\rangle$  状態に対して結合エネルギーは右の電流パターンにかかわらず左の電流パターンが他のどれである場合よりも大きくなっている。特に  $V_{no}^n$  は  $34(a)$  以上離さないで無視できる値にはならない。(ii)  $\sigma$  対称性を有する電流パターンとの結合エネルギー。  $V_{ef}^e$  は  $r_x = 26(a)$  で無視できるほど小さくなる。

## § 9 外部電流を量子ビットカップラーとして使用する

§ 5 章でスピン渦誘起ループ電流が量子ビットとして利用できることを示した。§ 8 章では SVQ の周りに流れる電流を量子ビットとしてその間の結合が距離を離すことによって切れ、またその距離も SVQ のサイズと比較してそれほど長くはないことも確認された。スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして、単一量子ビットに相当する電流パターン 2 つを独立させ、必要に応じて結合させる方法は 2 通り考えられる。1 つは、カップラービットを用いてその結合エネルギーの電流パターンごとの違いを利用して結合を制御する方法、もう 1 つが超伝導状態を壊さない程度の一定な外部電流を系に流しこむことで、 $\chi$  の巻き数を変えることなく運動エネルギーを変化させ、2 つの量子ビットを結合する方法である。本論では、後者の方法で 2 量子ビット間の結合を制御する。2 量子ビットの系として、Fig. 16 の  $44a \times 6a$  の系を用意し、2 つの SVQ を中心距離にして  $38(a)$  だけ離す。単一量子ビットとして Fig. 8 ( $|LLRR\rangle$ )、( $|RRLL\rangle$ ) の電流を利用する。これらをそれぞれ  $|U\rangle$ 、 $|D\rangle$  状態と呼称し、これらを量子ビットの  $|1\rangle$ 、 $|0\rangle$  に見立てて計算を行う。また、これを Dipole-Current-Qubit(DCQ) と呼称する。外部電流を流し込んだことによる運動エネルギーの変化は、2 通りの外部電流を同じサイトから流し込んだ系における直交する固有状態における運動エネルギーの値と流し込んだ電流密度の大きさから 2 次関数の係数を一次連立方程式をそれぞれの状態に対して解くことで求める。外部電流が  $\langle \Phi_i | (H_B + H_U) | \Phi_i \rangle$  の変化は全ての状態に対してほぼ等しいので無視した。計算された 2 量子ビットの系を Fig. 20 に示す。そこに青矢印で示したサイトにその方向に外部電流を  $0.049(2e/\hbar)$  だけ印加した系の電流を Fig. 21 に示す。この系のエネルギー準位は Fig. 23 に示した。磁場が印加されていない状態では全ての準位が縮退しているが、外部から 1 次の勾配磁場を印加することでそれぞれの DCQ は違う大きさだけ磁場の大きさに応じて分裂する。そこに外部電流も加えることで、4 状態に共通であった運動エネルギーの値は量子ビットの結合を示す。実際、Fig. 22 によると、 $|J_{ex}| = 0.049(2e/\hbar)$  の電流を流しこむことで 2 つの量子ビットは十分な結合を示し、更に  $0.085(2e/\hbar)$  の電流を流し込むことで  $|DU\rangle$  は  $|UU\rangle$  状態と、 $|DD\rangle$  状態は  $|UD\rangle$  状態と準位が逆転する。これは、運動エネルギーが外部電流に対して 2 乗に比例して大きくなり、その比例係数が全ての準位で異なる故であるが、そのような準位の交差は予期せぬ遷移の元になるため、 $J_{ex} = 0.049(2e/\hbar)$  以上の電流は流さないものとする。しかしながら、この交差そのものは、量子アニーリングに応用が可能である。遷移双極子モーメントは、単一量子ビットの遷移に対するものの  $y$  成分だけが大きく、他の遷移についてはそれらと比較してかなり小さくなっている。単一量子ビットの遷移に対応するそれらも単一 SVQ のそれと比べると 1 桁小さくなっている。しかし、これは後述する 4 量子ビットの系についても単一量子ビットの遷移に対するそれらはほぼ同じ値になる。従って、遷移双極子モーメントは量子ビットの数が増えるほど小さくなるというわけではない。それでも、遷移双極子モーメントは量子ビットとして利用するのに十分に大きな値となっている (Table. 5)。また、Fig. 18 のように一部の銅原子を置換し、そのサイトを含むパスについて  $t' = 0.5t$ 、 $U' = 1.25U$  として計算を行った。今回も  $x = 22$  と  $x = 24$  に属する原子を置換した。その結果、系の中心に電流の存在しない領域ができ (Fig. 24)、外部電流を流し込むと系の中心に流れる外部電流は障壁原子に置換しない系と比べて少し強くなっている (Fig. 25)。エネルギー準位は障壁原子が存在しない系 (Fig. 20) と比較して外部電流を印加

していない状態についてはあまり変化はないが、外部電流に対してエネルギー変化の係数は3程度大きく  
 なっている (Fig. 26、27)。しかし、単一量子ビットの遷移に相当する遷移双極子モーメントは左側と右側  
 の DCQ で差が Fig. 20 の系に比べて小さくなっている。これは、障壁原子の影響で電流は系の中心に存在  
 しなくなり、2つの量子ビットが有する電流は交わらなくなったためであると考えられる (Table. 6)。

Table. 5 DCQ2 量子ビット系の各状態間の遷移の遷移双極子モーメントの  $x$  成分と  $y$  成分。

k	l	$\mu_{kl}^y (10^{-30} \text{C} \cdot \text{m})$	$\mu_{kl}^x (10^{-30} \text{C} \cdot \text{m})$
$ DD\rangle$	$ UU\rangle$	$1.326 \times 10^{-5}$	0
$ DD\rangle$	$ DU\rangle$	9.475	$7.097 \times 10^{-6}$
$ DD\rangle$	$ UD\rangle$	9.481	$4.043 \times 10^{-5}$
$ UU\rangle$	$ DU\rangle$	9.481	$4.043 \times 10^{-5}$
$ UU\rangle$	$ UD\rangle$	9.475	$7.097 \times 10^{-6}$
$ DU\rangle$	$ UD\rangle$	$3.084 \times 10^{-7}$	0

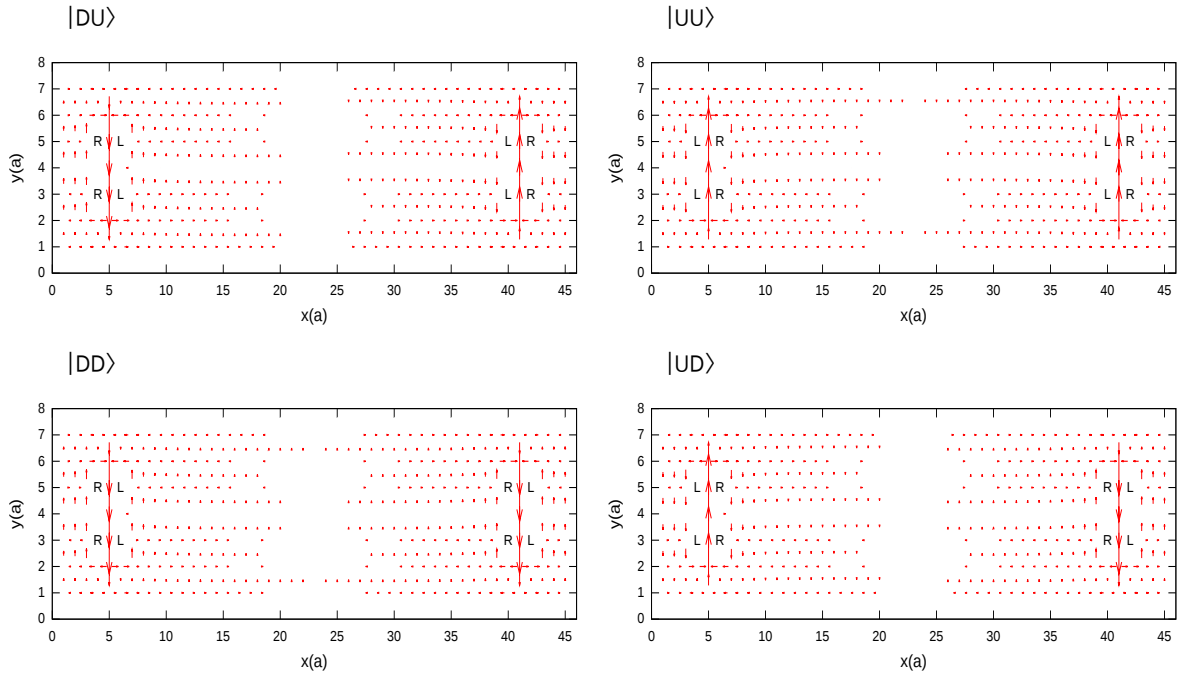


Fig. 20 2量子ビット系の4状態。左上から右下にそれぞれ  $|DU\rangle$ 、 $|UU\rangle$ 、 $|DD\rangle$ 、 $|UD\rangle$  である。系の  
 の大きさは  $44a \times 6a$  である。2つの DCQ の中心は  $36a$  離れているため、お互いにエネルギー的には  
 影響を及ぼしあうことはない。

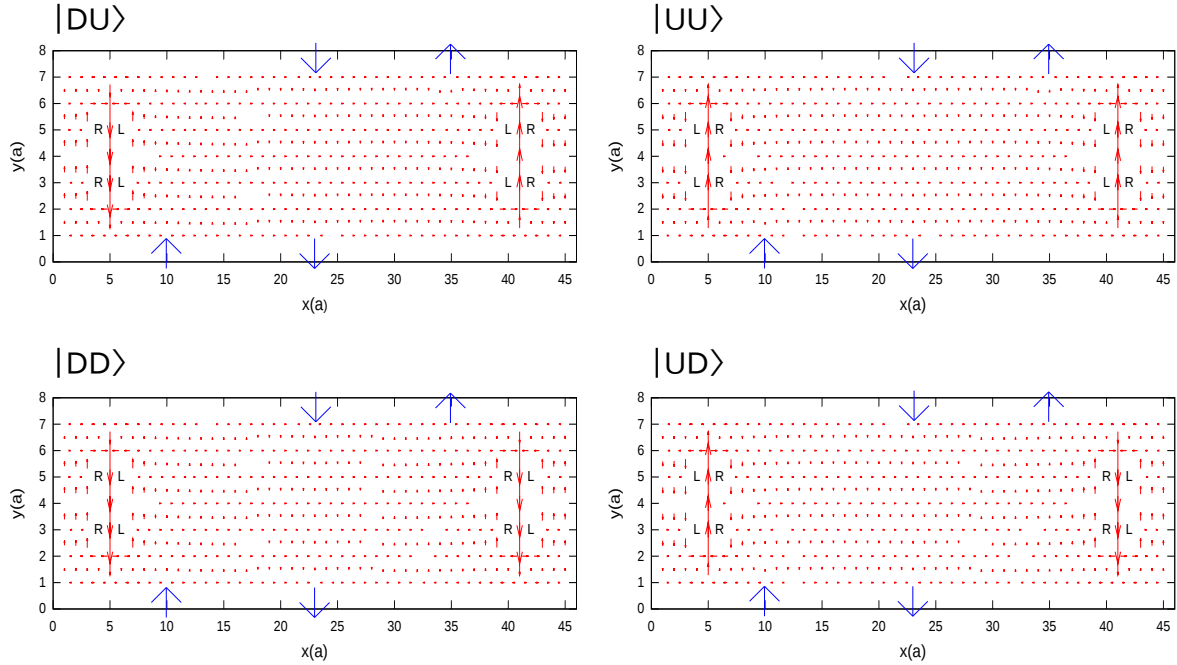


Fig. 21 DCQ2 量子ビット系の 4 状態に外部から電流を流した状態の図。青い矢印の方向から電流を流している。サイト  $(x, y) = (10, 1)$ 、 $(x, y) = (23, 7)$  から電流を流し込み、 $(x, y) = (23, 1)$ 、 $(x, y) = (35, 7)$  から電流が流れ出ている。外部電流の強さは  $J_{ex} = 0.049(2et/\hbar)$  で統一してある。

Table. 6 バリア原子を設けた DCQ2 量子ビット系の各状態間の遷移の遷移双極子モーメントの  $x$  成分と  $y$  成分。

k	l	$\mu_{kl}^y (10^{-30} \text{C} \cdot \text{m})$	$\mu_{kl}^x (10^{-30} \text{C} \cdot \text{m})$
$ DD\rangle$	$ UU\rangle$	$4.741 \times 10^{-6}$	0
$ DD\rangle$	$ DU\rangle$	9.483	$1.972 \times 10^{-6}$
$ DD\rangle$	$ UD\rangle$	9.482	$2.67 \times 10^{-6}$
$ UU\rangle$	$ DU\rangle$	9.482	$2.67 \times 10^{-6}$
$ UU\rangle$	$ UD\rangle$	9.483	$1.972 \times 10^{-6}$
$ DU\rangle$	$ UD\rangle$	$5.329 \times 10^{-7}$	0

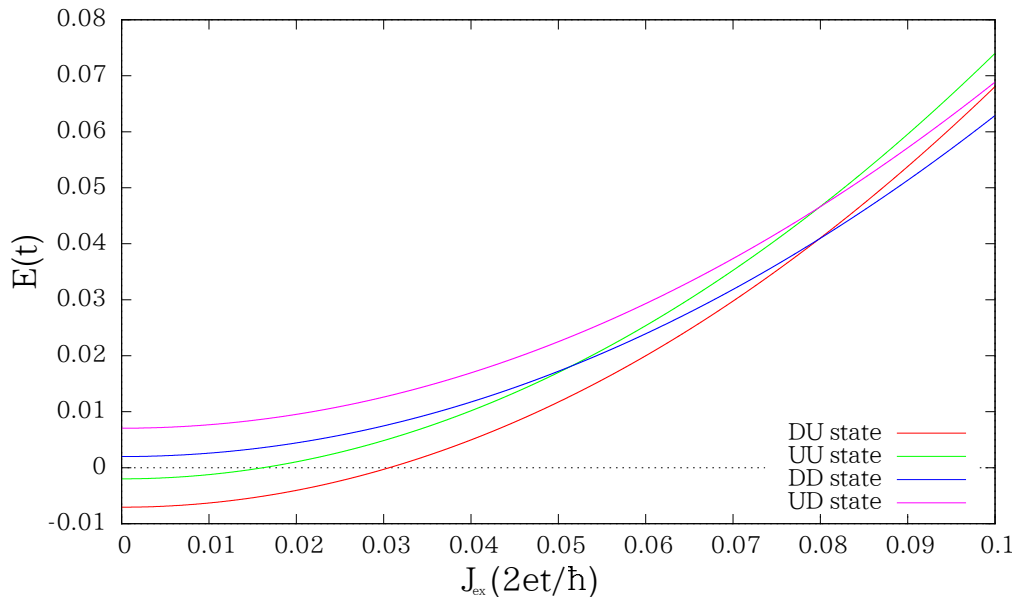


Fig. 22 DCQ2 量子ビット系における外部電流の大きさに対するエネルギー準位の分裂の変化をプロットしたもの。  $B = 0$  かつ  $J_{ex} = 0$  の場合のエネルギーをゼロ点としている。横軸は外部電流の大きさを  $J_{ex}(2et/\hbar)$  で、縦軸はエネルギー準位の分裂を  $t$  の単位で表している。

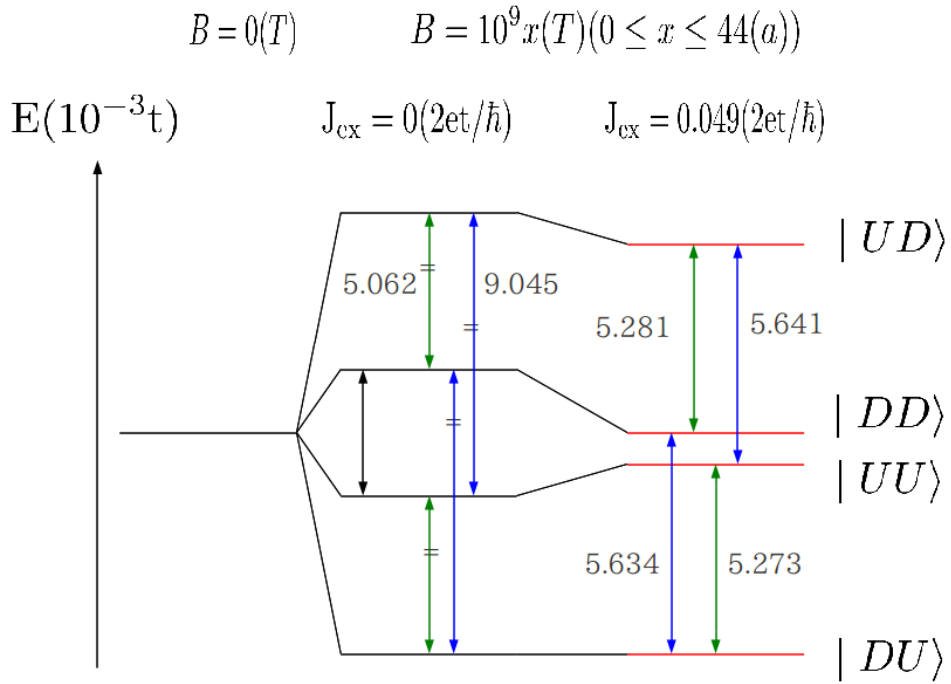


Fig. 23 DCQ2 量子ビット系のエネルギー準位の差を表した図。外部電流を流し込まず、磁場も掛けない状態では、全ての準位が縮退している。しかし、 $x$  軸方向に  $0.4(T/a)$  の一次勾配磁場をかけることでそれぞれの量子ビットは別々に分裂する。外部電流を流しこむことで、それぞれのエネルギー準位差には  $10^{-6}(t)$  程度の違いが生じ、2 つの量子ビットは結合する。

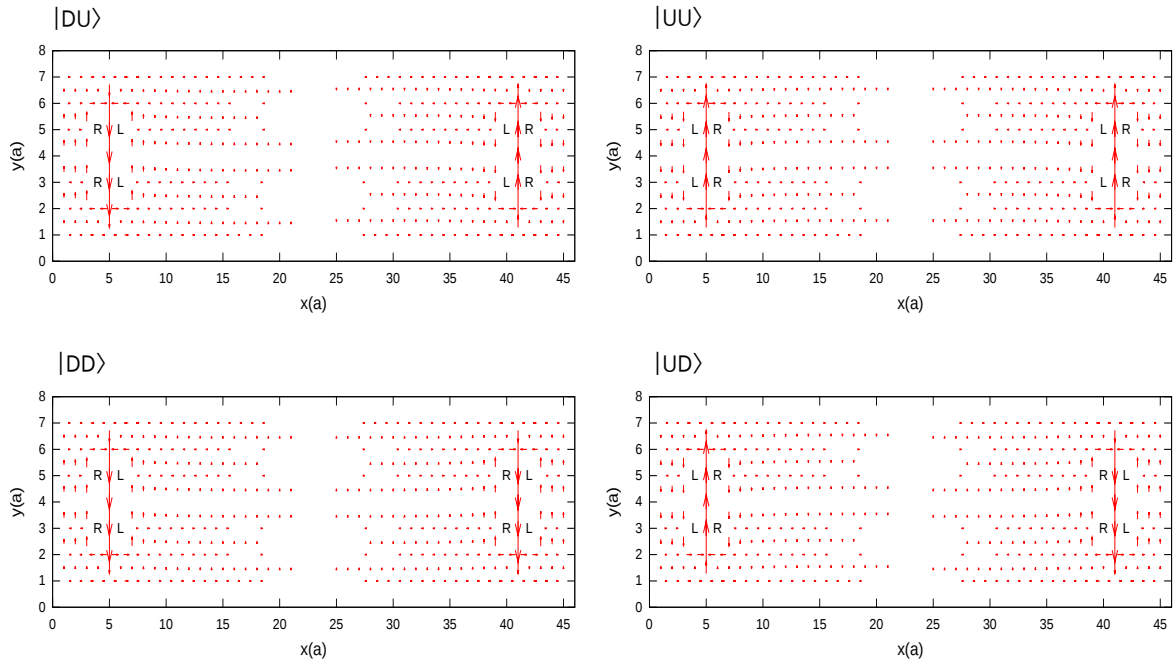


Fig. 24 パリア原子を設けた 2 量子ビット系の 4 状態。左上から右下にそれぞれ  $|DU\rangle$ 、 $|UU\rangle$ 、 $|DD\rangle$ 、 $|UD\rangle$  である。系の大きさは Fig. 16 と同じく  $44a \times 6a$  である。2 つの DCQ の中心は  $36(a)$  離れているため、お互いにエネルギー的には影響を及ぼしあうことはない。 $x = 22, 24$  に属する原子はパリア原子に置換してある。そのサイトを含むパスは  $\nu' = 0.5t$ 、そのサイトでは  $U' = 10t$  としてある。

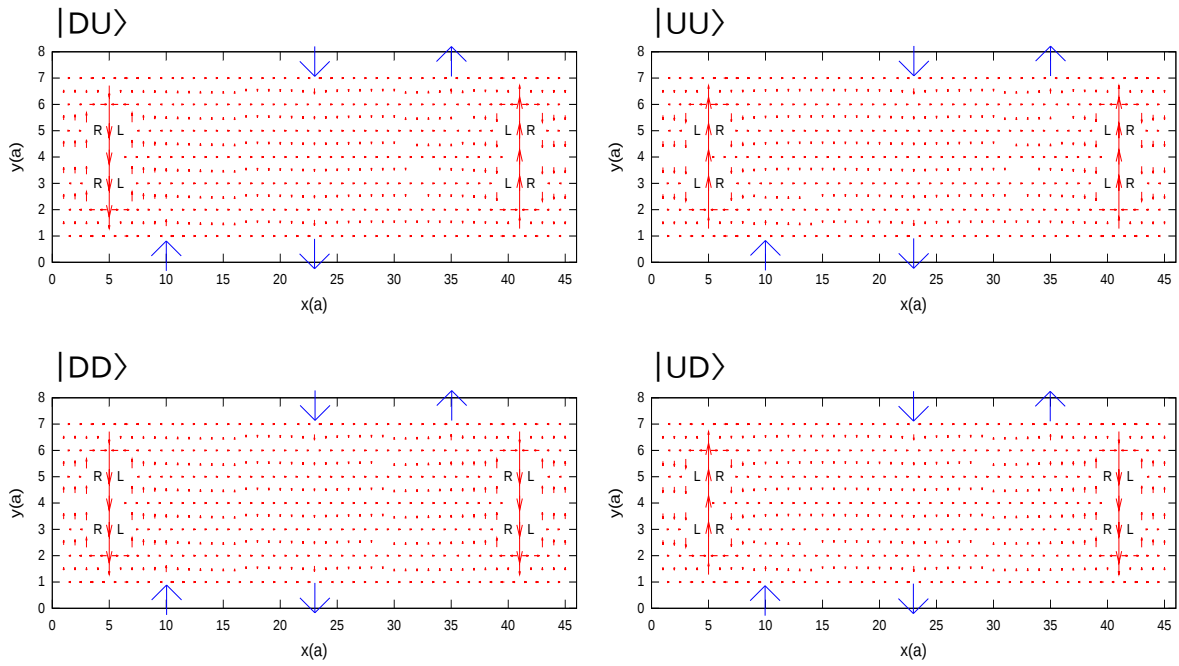


Fig. 25 バリア原子を設けた DCQ2 量子ビット系の 4 状態に外部から電流を流した状態の図。青い矢印の方向から電流を流している。サイト  $(x, y) = (10, 1)$ 、 $(x, y) = (23, 7)$  から電流を流し込み、 $(x, y) = (23, 1)$ 、 $(x, y) = (35, 7)$  から電流が流れ出ている。外部電流の強さは  $J_{ex} = 0.049(2et/\hbar)$  で統一してある。



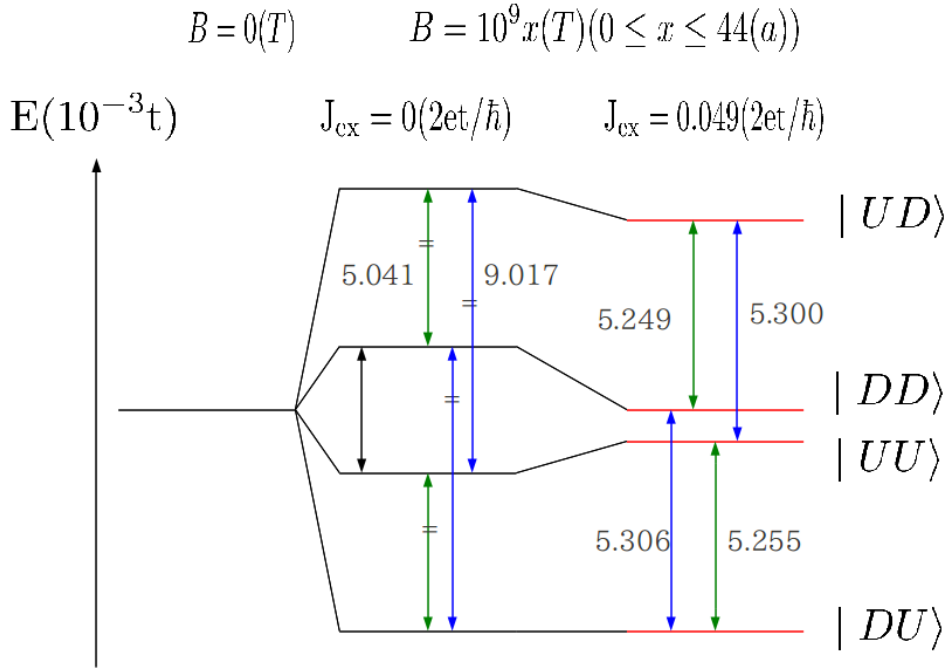


Fig. 26 バリア原子を設けた DCQ2 量子ビット系のエネルギー準位の差を表した図。外部電流を流し込まず、磁場も掛けない状態では、全ての準位が縮退している。しかし、 $x$  軸方向に  $0.4(T/a)$  の一次勾配磁場をかけることでそれぞれの量子ビットは別々に分裂する。外部電流を流しこむことで、それぞれのエネルギー準位差には  $10^{-5}(t)$  程度の違いが生じ、2 つの量子ビットは結合する。

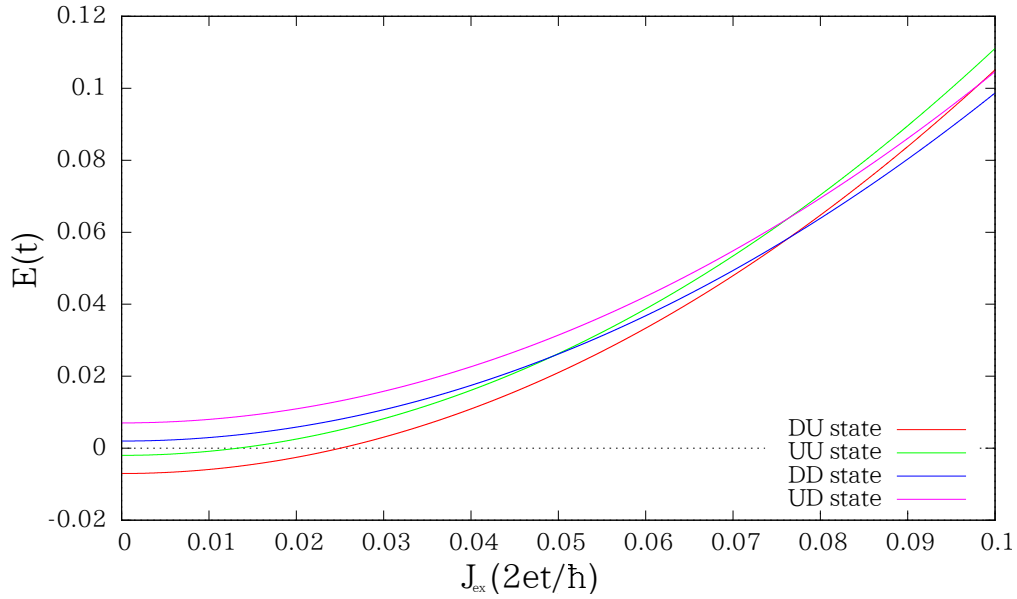


Fig. 27 バリア原子を設けた DCQ2 量子ビット系における外部電流の大きさに対するエネルギー準位の分裂の変化をプロットしたもの。 $B = 0$  かつ  $J_{ex} = 0$  の場合のエネルギーをゼロ点としている。横軸は外部電流の大きさを  $J_{ex}(2et/h)$  で、縦軸はエネルギー準位の分裂を  $t$  の単位で表している。

## 9.1 観測の方法

この節では、スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとして、それを磁場を観測することで状態を判別する方法について論じる。まず、電流の大きさは、 $2et/\hbar = 2t\Phi_0/\pi = 6.328 \times 10^{-5}(\text{A})$  である。ここで、Biot-Savart の法則によると経路  $C$  に沿って流れる電流  $\mathcal{J}$  が点  $\mathbf{r}$  につくる磁場  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  は

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{\mu_0 \mathcal{J}}{4\pi} \int_C \frac{d\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (9.1)$$

である。ここで  $\mu_0$  は真空の透磁率<sup>\*11</sup>、 $\mathbf{r}'$  は  $C$  上の点を表す。ボンド  $j \leftrightarrow k$  を流れる電流  $\mathcal{J}_{j \leftrightarrow k}$  が点  $\mathbf{r}$  につくる磁場  $\mathbf{B}_{j \leftrightarrow k}(\mathbf{r})$  は (9.1) を使って

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{j \leftrightarrow k}(\mathbf{r}) &= \frac{\mu_0 \mathcal{J}_{j \leftrightarrow k}}{4\pi} \int_{r_j}^{r_k} \frac{d\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &= \frac{\mu_0 \mathcal{J}_{j \leftrightarrow k}}{4\pi} \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) \left( \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \times \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{a}}{\left| (\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \times \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{a} \right|^2} + \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{a}}{\left| (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{a} \right|^2} \right) \\ &= \alpha \tilde{\mathbf{B}}_{j \leftrightarrow k}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (9.2)$$

---

<sup>\*11</sup>  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} [\text{N} \cdot \text{A}^{-2}]$

と求まる<sup>\*12</sup>。ここで

$$\tilde{\mathbf{B}}_{j \leftrightarrow k}(\mathbf{r}) = \tilde{\mathcal{J}}_{j \leftrightarrow k} \cdot \frac{1}{2} \left( \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) \left( \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \times (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j)}{\left| (\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) \times \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{a} \right|^2} + \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j)}{\left| (\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times \frac{\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_j}{a} \right|^2} \right) \quad (9.3)$$

$$\alpha = \frac{\mu_0 t}{2\Phi_0 a} = \frac{(4\pi \times 10^{-7} [\text{N} \cdot \text{A}^{-2}]) \times ((130 \times 10^{-3} [\text{eV}]) \times (1.602 \times 10^{-19} [\text{J} \cdot \text{eV}^{-1}]))}{2 \times (2.0678 \times 10^{-15} [\text{T} \cdot \text{m}^2]) \times (4.0 \times 10^{-10} [\text{m}])} \doteq 15.820 \times 10^{-3} [\text{T}] \quad (9.4)$$

である<sup>\*13</sup>。したがってすべてのボンドを流れる電流がつくる磁場  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  は

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N \{ \mathbf{B}_{j \leftrightarrow X(j)}(\mathbf{r}) + \mathbf{B}_{j \leftrightarrow Y(j)}(\mathbf{r}) \} = \alpha \sum_{j=1}^N \{ \tilde{\mathbf{B}}_{j \leftrightarrow X(j)}(\mathbf{r}) + \tilde{\mathbf{B}}_{j \leftrightarrow Y(j)}(\mathbf{r}) \} \quad (9.5)$$

となる。これを用いて、DCQ2 量子ビット系における電流が発する磁場の  $z$  成分は、 $a$  だけ離れた  $xy$  平面の各点で計算した分布を Fig. 28 に示す。一方の量子ビットの電流はもう一方の電流が生じる磁場に影響をほとんど及ぼさないことがわかる。また、SVQ の周りに流れる電流パターンでさえ磁場の分布から判別可

<sup>\*12</sup> 例えば  $k = X(j)$  のとき

$$\begin{aligned} \int_{r_j}^{r_{X(j)}} \frac{d\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} &= \int_{r_j}^{r_{X(j)}} \frac{-(z - z')dr' \mathbf{e}_y + (y + y')dr' \mathbf{e}_z}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \\ &= \underbrace{\int_{x_j}^{x_{X(j)}} \frac{dx'}{\{(x - x')^2 + (y - y_j)^2 + (z - z_j)^2\}^{3/2}}}_{I} \{ -(z - z_j)\mathbf{e}_y + (y - y_j)\mathbf{e}_z \} \end{aligned}$$

$y_j = y_{X(j)}$ 、 $z_j = z_{X(j)}$  であることに注意しよう。そのため  $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times \mathbf{e}_x = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{X(j)}) \times \mathbf{e}_x$  である。ここで  $u = \sqrt{(y - y_j)^2 + (z - z_j)^2}$ 、 $x - x' = u \tan \theta$  ( $-\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ ) とおくと  $dx' = -\frac{u d\theta}{\cos^2 \theta}$ 、 $x^2 + u^2 = \frac{u^2}{\cos^2 \theta}$  であるから

$$\begin{aligned} I &= - \int_{\theta_{x_j}}^{\theta_{x_{X(j)}}} \frac{u}{\cos^2 \theta} / \left( \frac{u^2}{\cos^2 \theta} \right)^{3/2} d\theta \\ &= -\frac{1}{u^2} \int_{\theta_{x_j}}^{\theta_{x_{X(j)}}} \cos \theta d\theta \\ &= -\frac{1}{u^2} (\sin \theta_{x_{X(j)}} - \sin \theta_{x_j}) \\ &= \left( \frac{x - x_{X(j)}}{\sqrt{(x - x_{X(j)})^2 + u^2}} - \frac{x - x_j}{\sqrt{(x - x_j)^2 + u^2}} \right) \frac{1}{u^2} \end{aligned}$$

となる。したがって

$$\begin{aligned} \int_{r_j}^{r_{X(j)}} \frac{d\mathbf{r}' \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} &= \left( \frac{x - x_{X(j)}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{X(j)}|} - \frac{x - x_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) \frac{(z - z_j)\mathbf{e}_y - (y - y_j)\mathbf{e}_z}{(y - y_j)^2 + (z - z_j)^2} \\ &= \frac{\mathbf{e}_x}{2} \cdot \left( \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{X(j)}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{X(j)}|} - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) \left( \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{X(j)}) \times \mathbf{e}_x}{|(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{X(j)}) \times \mathbf{e}_x|^2} + \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times \mathbf{e}_x}{|(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \times \mathbf{e}_x|^2} \right) \end{aligned}$$

さらに  $\mathbf{e}_x = (\mathbf{r}_{X(j)} - \mathbf{r}_j)/a$  を使えばよい。

<sup>\*13</sup>  $\text{T} = \text{N} \cdot \text{A}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}$ 、 $\text{J} = \text{N} \cdot \text{m}$  を使うと  $\frac{\text{N} \cdot \text{A}^{-2} \cdot \text{J}}{\text{T} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{m}} = \frac{\text{T} \cdot \text{m} \cdot \text{A}^{-1} \cdot \text{J}}{\text{N} \cdot \text{A}^{-1} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{m}} = \text{T}$  となる。

能であることもわかる。従って、NV 中心などの高精度磁場センサーを用いることで電流パターンを判別し、個別に単一量子ビットに相当する電流パターンを観測することが可能であると思われる。

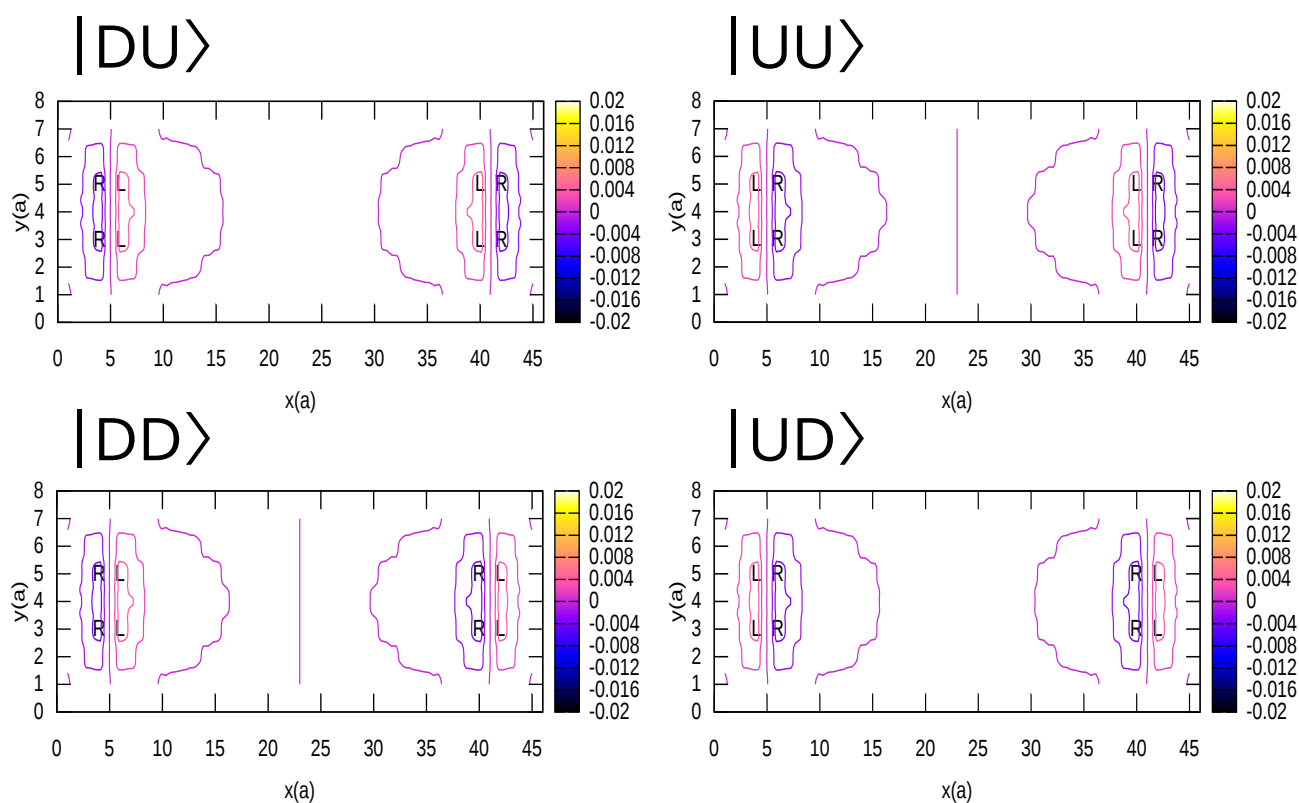


Fig. 28 DCQ2 量子ビット系における  $\text{CuO}_2$  平面から  $1a$  だけ  $z$  軸方向に離れた  $xy$  平面における  $z$  軸方向の磁場分布。単位は  $T$ 、等高線の色が磁場の強さを表す。どの状態も SVQ の周りにおける磁場分布は電流の形を示し、その大きさはどの状態でも最大  $0.004(T)$  程度になっている。

## § 10 4 量子ビット系

この章では、前章までの結果を踏まえて、4 量子ビット系がどのようなものか、またその各々の状態間の遷移双極子モーメントについて議論する。まず、4 量子ビット系は、DCQ を横に 4 つ並べ、両端の量子ビットのみ  $y$  軸方向にずらして配置することで実現する。各々の量子ビットの間には障壁原子を設け、そのサイトを含むパスに対して  $t' = 0.05t$ 、それらのサイトに対して  $U' = 10t$  とした (Fig. 30)。この系のエネルギー準位を Fig. 29 に示す。全ての量子ビットは独立を保っている。遷移双極子モーメントは  $y$  成分が非常に大きく、中心の 2 量子ビットそれぞれの遷移に対する値は  $10^{-29}(C \cdot m)$  にもなる (Table. 7)。しかしながら、外部電流を流し込んだ直交状態における運動エネルギーの値を用いて外部電流による運動エネルギーの変化を計算する方法は使えない。なぜなら、外部電流による波動関数の変化は小さいとはいえ局所的なため、無視することができなくなるからである。2 量子ビットの場合は外部電流の影響が全体に及ぶためこのようなことは考える必要がなかった。そのため、量子ビットが 3 つ以上であっても外部電流の影響を精度よく計算する方法を確立する必要がある。

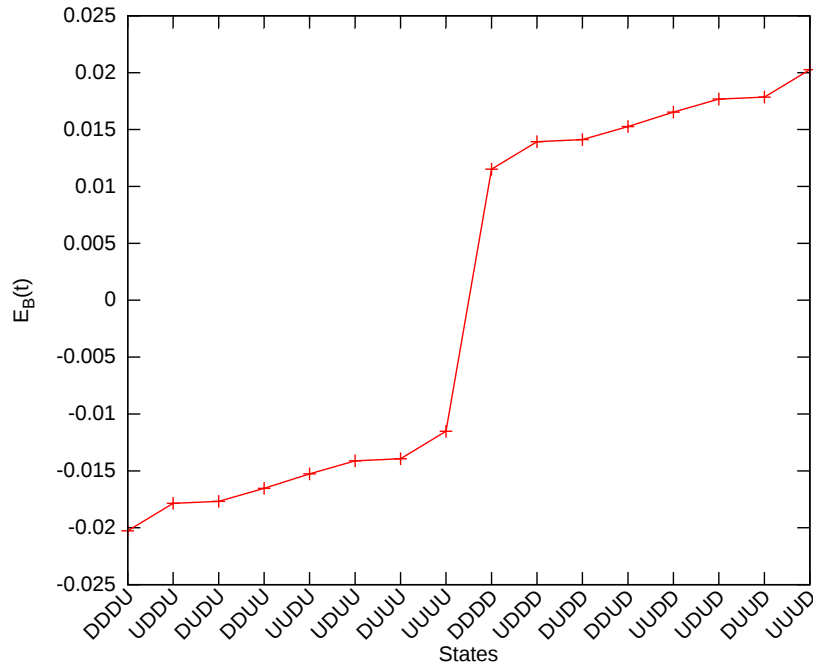


Fig. 29 DCQ4 量子ビット系におけるエネルギー準位。横軸は量子ビットの状態組を、縦軸はエネルギー準位を表す  $(t)$ 。エネルギー準位の原点は  $\langle \Phi_i | (K + H_U) | \Phi_i \rangle$  とした。

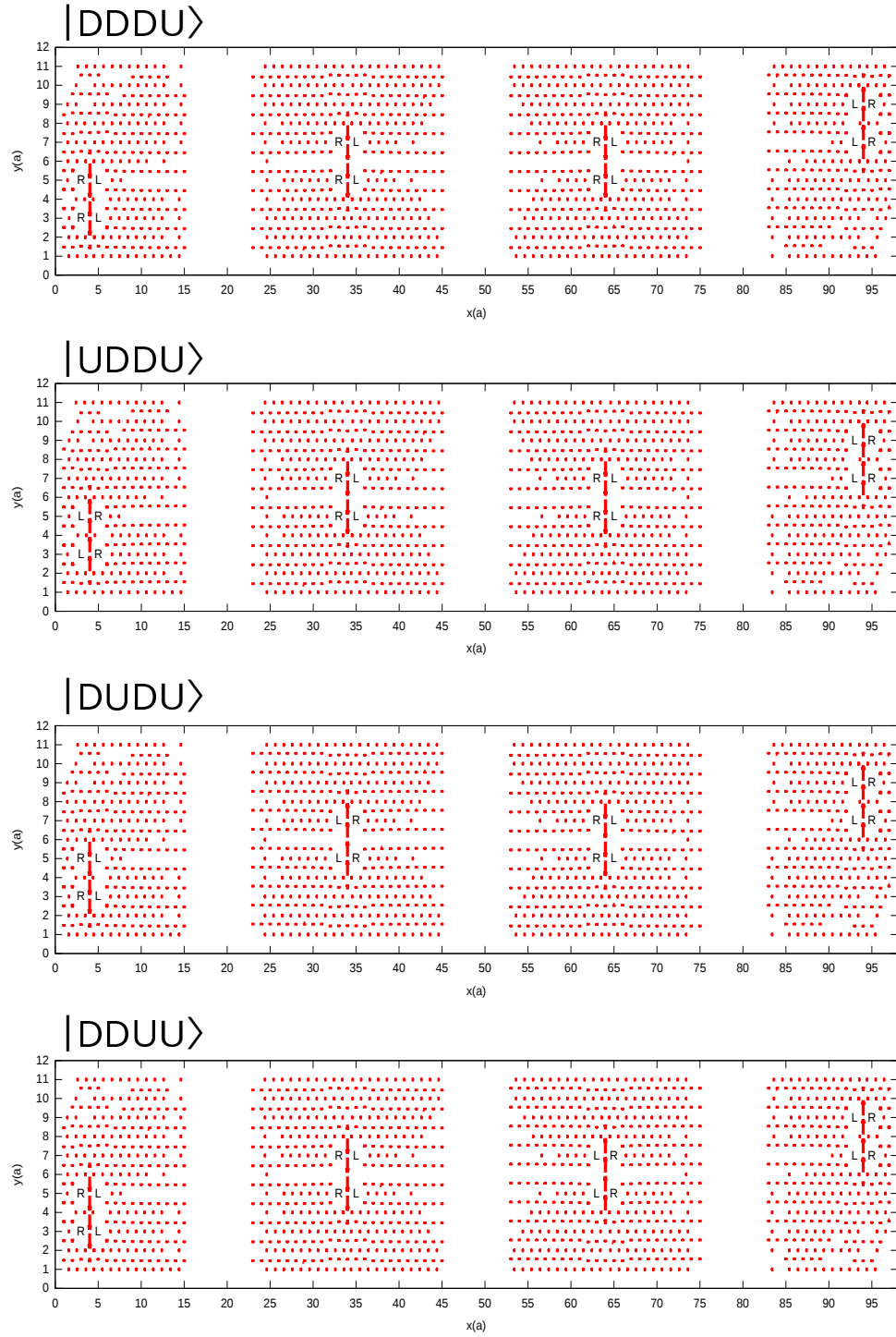


Fig. 30 DCQ4 量子ビット系における下から 4 番目までの電流状態。上から順にエネルギーが大きくなる。 $x = 16, 22, 46, 52, 76, 82$  に属する原子を別な原子に置換し、簡単のため Jahn-Teller 効果による格子の歪みは計算せず、その原子を含むパスについて  $t' = 0.05t$ 、 $U' = 10t$  とした。

Table. 7 4 量子ビット系の各状態間における遷移双極子モーメント。上から 2 番目の行における状態名は縦読みにした。上三角部分が  $x$  成分。下三角部分が  $y$  成分である。

$\mu^x(10^{-30}C \cdot m)$																
$l$ $k$	D	U	D	D	U	U	D	U	D	U	D	D	U	U	D	U
	D	D	U	D	U	D	U	U	D	D	U	D	U	D	U	U
	D	D	D	U	D	U	U	U	D	D	D	U	D	U	U	U
	U	U	U	U	U	U	U	U	D	D	D	D	D	D	D	D
DDDU	0	0.048	0	0	0	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0	0	0
UDDU	9.525	0	0	0	0	0	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0	0
DUDU	10.603	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0
DDUU	10.604	0	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0	0.048	0	0	0	0
UUDU	0	10.603	9.526	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.048	0	0	0
UDUU	0	10.603	0.001	9.527	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.048	0	0
DUUU	0	0.001	10.603	10.602	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0	0	0.048	0
$\mu^y$ UUUU	0	0	0	0	10.604	10.604	9.524	0	0	0	0	0	0	0	0	0.048
DDDD	9.526	0	0	0	0	0	0	0	0	0.048	0	0	0	0	0	0
UDDD	0	9.526	0.001	0	0	0	0	0	9.524	0	0	0	0	0	0	0
DUDD	0	0.001	9.526	0	0	0	0	0	10.604	0	0	0	0.048	0	0	0
DDUD	0	0	0	9.526	0	0	0	0	10.604	0	0	0	0	0.048	0	0
UUDD	0	0	0	0	9.526	0	0	0	0	10.602	9.527	0	0	0	0	0
UDUD	0	0	0	0	0	9.526	0.001	0	0	10.603	0.001	9.526	0	0	0	0
DUUD	0	0	0	0	0	0.001	9.526	0	0	0.001	10.603	10.603	0	0	0	0.048
UUUD	0	0	0	0	0	0	0	9.526	0	0	0	0	10.604	10.603	9.525	0

## § 11 結論

この研究を通じて、スピン渦誘起ループ電流が DiVincenzo の 5 条件を理論の上ではすべてクリアし、実用量子ビットの最有力候補になりうるということが明らかになった。先行研究から初期化が容易に実現することが [7]、9.1 節の結果から電流そのものが発する磁場を観測することで単一量子ビットに相当する電流パターンの識別が可能のため、観測が容易であることが、§ 6, § 7 章の結果から電流パターンが有する遷移双極子モーメントを用いて高速で量子計算が実行できることが、そして § 8, § 9, § 10 章の結果からスピン渦誘起ループ電流は独立した複数の量子ビットとして扱うことが可能で、その間の結合を外部電流で制御することによってナノスケールの範囲に集積可能であることが明らかになった。これらから、スピン渦誘起ループ電流は 5 条件のうち 1, 2, 3, 5, を満たすことが理論的に確認されたと言える。4, はまだ数値計算によって証明していないが、この電流はトポロジカルなパラメーターである  $\chi$  の巻き数によって保護されているので、満たしていると予想される。4 量子ビット系の結果を元に量子誤り訂正のシミュレーションが可能なので、その結果から示せるだろう。しかしながら、課題がいくつか残った。まず、4 量子ビット系の遷移双極子モーメントは計算されたものの、それを用いて量子ビットを独立にした量子計算のシミュレーションはまだ行っていない。外部電流を流し込んだ状態の運動エネルギーの変化を波動関数の変化が局所的であっても計算できる方法を考え、それを元に外部電流による特定の量子ビット間のみ結合を起こさせる方法を確認し、制御演算のシミュレーションが 3 量子ビット以上を有する系においても実行できるようにする必要がある。これが第一の課題である。また、4, を示すため、量子誤り訂正のシミュレーションを 2 次元表面コードの手法 [6] を用いて行う必要がある。更に、外部電流を用いて独立した特定の 2 量子ビットの間に結合が作れる。しかしながら、流しこむ外部電流の密度が大きくなると、準位の逆転が起こる。これは予期せぬ遷移の原因になる。そのため、そこでどのように遷移が起こるのかを明らかにする必要がある。その結果を利用して、量子アニーリングが可能になるかもしれない。加えて、現状、私は  $\text{CuO}_2$  平面 1 層のみを考えて計算している。しかし、より現実の系に近い形で計算を行わなければならない。ブロック層の影響はスピン渦誘起ループ電流にあまり寄与しないと予想されるが、ジョセフソン効果を利用した新たな量子計算手法を確立できるかもしれない。また、 $\text{CuO}_2$  平面も 2 層以上用意し、計算することも有意義であると思われる。なぜなら、ホールは特異点になり、3 次元空間上では  $z$  軸方向を向く線なので、スピン渦誘起ループ電流が発する磁場を通じて、複数の層にわたって  $\chi$  の巻き数を特異線で結合し、磁束線の組み換えを利用してトポロジカル量子計算が可能になるかもしれないからである。これらの課題をクリアすることで、スピン渦誘起ループ電流は DiVincenzo の 5 条件すべてを満たすことが明らかになり、この電流は実用量子ビットの最有力候補になると思われる。そのみならず、トポロジカル量子計算、量子アニーリングも可能になる。そして、量子コンピューターの設計は Fig. 31 の形になると思われる。この電流を量子ビットとして利用することで、100 量子ビットの系であっても  $360a \times 360a$  の範囲に収まり、更に量子誤り訂正も実装可能なため、他のどのような量子ビットにおける量子コンピューターの予想形より現実的であると言える。



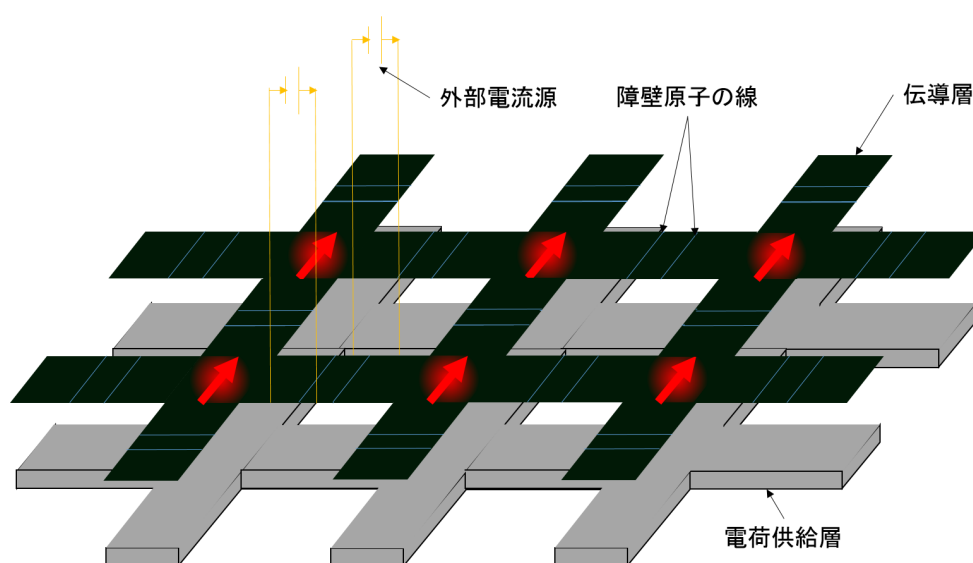


Fig. 31 スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューターの予想図。赤い矢印が量子ビットの状態を表す。青い線はその部分の Cu 原子は別な原子に置換することを表す。オレンジ色の線は外部電流の供給源に通じる導線。この外部電流によって量子ビットを結合する。本来なら全ての量子ビットの間には外部電流供給用の導線が存在する。

## 参考文献

- [1] Hikaru Wakaura and Hiroyasu Koizumi. Possible use of spin-vortex-induced loop currents as qubits: A numerical simulation for two-qubit system. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 521522:55 – 66, 2016.
- [2] Mark Fox. *Quantum Optics*. OXFORD University Press, 2006.
- [3] Thomas Monz, Philipp Schindler, Julio T. Barreiro, Michael Chwalla, Daniel Nigg, William A. Coish, Maximilian Harlander, Wolfgang Hänsel, Markus Hennrich, and Rainer Blatt. 14-qubit entanglement: Creation and coherence. *Phys. Rev. Lett.*, 106:130506, Mar 2011.
- [4] David P. DiVincenzo. The physical implementation of quantum computation. *arXiv:quant-ph*, (0002077v3), 2008.
- [5] J. Kelly and et. al. State preservation by repetitive error detection in a superconducting quantum circuit. *Nature*, 519:66–69, 2015.
- [6] Charles. D. Hill and et. al. A surface code quantum computer in silicon. *Science Advances*, 1(9, e1500707), 2016.
- [7] Akira Okazaki, Hikaru Wakaura, Hiroyasu Koizumi, Michel Abou Ghantous, and Masashi Tachiki. Superconducting transition temperature of the hole-doped cuprate as the stabilization temperature of super-current loops generated by spin-twisting itinerant motion of electrons. *J. Supercond. Nov. Magn.*, pages DOI 10.1007/s10948–015–3176–5, 2015.
- [8] A.P. Drozdov and et. al. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature*, 525(7567), 2015.
- [9] 立木 昌 and 藤田 敏三. 高温超伝導の科学. 1999.
- [10] Hiroyasu Koizumi, Ryo Hidekata, Akira Okazaki, and Masashi Tachiki. Persistent current generation by the spin-vortex formation in the cuprate with the single-valuedness constraint on the conduction electron wave functions. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 27(1):121–132, jan 2014.
- [11] M. Z. Hasan and C. L. Kane. *Colloquium* : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82:3045–3067, Nov 2010.
- [12] A. Lanzara, P. V. Bogdanov, X. J. Zhou, S. A. Kellar, D. L. Feng, E. D. Lu, T. Yoshida, H. Eisaki, A. Fujimori, K. Kishio, J.-I. Shimoyama, T. Noda, S. Uchida, Z. Hussain, and Z.-X. Shen. Evidence for ubiquitous strong electron-phonon coupling in high-temperature superconductors. *Nature*, 412(6846):510–514, August 2001.
- [13] R. Hidekata and H. Koizumi. Spin-vortices and spin-vortex-induced loop currents in the pseudogap phase of cuprates. *J. Supercond. Nov. Magn.*, 24:2253, 2011.
- [14] David LeBoeuf, Nicolas Doiron-Leyraud, Julien Levallois, R. Daou, J.-B. Bonnemaison, N. E. Hussey, L. Balicas, B. J. Ramshaw, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, S. Adachi, Cyril Proust, and

- Louis Taillefer. Electron pockets in the fermi surface of hole-doped high- $T_c$  superconductors. *Nature*, 450(7169):533–536, 2007.
- [15] Jing Xia, Elizabeth Schemm, G. Deutscher, S. A. Kivelson, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, W. Siemons, G. Koster, M. M. Fejer, and A. Kapitulnik. Polar kerr-effect measurements of the high-temperature  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  superconductor: Evidence for broken symmetry near the pseudogap temperature. *Physical Review Letters*, 100(12):127002.
- [16] L. Mangin-Thro, L. Sidis, A. A. Wildes, and et.al. Intra-unit-cell magnetic correlations near optimal doping in  $YBa_2Cu_3O_{6.85}$ . *Nat. Comm.*, 6(7705), 2015.
- [17] Chandra Varma. High-temperature superconductivity: Mind the pseudogap. *Nature*, 468(7321), 2010.
- [18] Takanori Hitomi and Youichi Yanase. Electric octupole order in bilayer rashba system. *Journal of the Physical Society of Japan*, 85(12):124702, 2016.
- [19] Giuliano Benenti, Giuliano Casati, and Giuliano Strini. *Principles of Quantum Computation and Information Volume I: Basic Concepts*. Springer, 2004.
- [20] A. Gozar and I. Bozovic. High temperature interface superconductivity. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 521522:38 – 49, 2016.
- [21] L. M. K. Vandersypen and I. L. Chuang. Nmr techniques for quantum control and computation. *Rev. Mod. Phys.*, 76:1037–1069, Jan 2005.
- [22] M. V. Gurudev Dutt and et. al. Quantum register based on individual electronic and nuclear spin qubits in diamond. *Science*, 316(5829):1312–1316, 6 2007.
- [23] B. E. Kane. A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature*, 393:133–137, 1998.
- [24] A Mezzacapo, J Casanova, L Lamata, and E Solano. Topological qubits with majorana fermions in trapped ions. *New Journal of Physics*, 15(3):033005, 2013.
- [25] C. Monroe, R. Raussendorf, A. Ruthven, K. R. Brown, P. Maunz, L.-M. Duan, and J. Kim. Large-scale modular quantum-computer architecture with atomic memory and photonic interconnects. *Phys. Rev. A*, 89:022317, Feb 2014.
- [26] M. W. Johnson, M. H. S. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, A. J. Berkley, J. Johansson, P. Bunyk, E. M. Chapple, C. Enderud, J. P. Hilton, K. Karimi, E. Ladizinsky, N. Ladizinsky, T. Oh, I. Perminov, C. Rich, M. C. Thom, E. Tolkacheva, C. J. S. Truncik, S. Uchaikin, J. Wang, B. Wilson, and G. Rose. Quantum annealing with manufactured spins. *Nature*, 473:194, 2011.
- [27] Ari Mizel, Daniel A. Lidar, and Morgan Mitchell. Simple proof of equivalence between adiabatic quantum computation and the circuit model. *Phys. Rev. Lett.*, 99:070502, Aug 2007.
- [28] C. Yoshimura and et. al. Uncertain behaviours of integrated circuits improve computational performance. *Scientific Reports*, 5(16213), 2015.
- [29] Shoko Utsunomiya, Kenta Takata, and Yoshihisa Yamamoto. Mapping of ising models onto injection-locked laser systems. *Opt. Express*, 19(19):18091–18108, Sep 2011.
- [30] Peter Fulde. *Electron correlations in molecules and solids*. Springer, Berlin [u.a.], 1995.

- [31] 秀方 遼. スピン渦誘起ループ電流の検出に関する理論的研究. Master's thesis, 筑波大学, 2012.
- [32] J. A. Vergés, E. Louis, P. S. Lomdahl, F. Guinea, and A. R. Bishop. Holes and magnetic textures in the two-dimensional hubbard model. *Phys. Rev. B*, 43:6099–6108, Mar 1991.
- [33] R. Car and M. Parrinello. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory. *Phys. Rev. Lett.*, 55:2471–2474, Nov 1985.
- [34] 岡崎 智. 外部からの電流とやりとりがあるスピン渦誘起ループ電流の安定性. In 日本物理学会第 68 回 年次大会, pages 26aPS–31, 徳島大学, 2013.
- [35] Tal Ezer and R. Kosloff. An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent schrödinger equation. *The Journal of Chemical Physics*, 81(9):3967–3971, nov 1984.
- [36] L. K. Grover. *Phys. Rev. Lett.*, 79:325, 1997.
- [37] K.-A. Brickman, P. C. Haljan, P. J. Lee, M. Acton, L. Deslauriers, and C. Monroe. Implementation of grover's quantum search algorithm in a scalable system. *Phys Rev. A*, 72(5):050306, nov 2005.

## § 12 謝辞

この研究を遂行するにあたって、多くの方々にお世話になりました。秀方 遼先輩は私が博士前期課程に進学し、右も左もわからない状態だったところに、研究の基礎をご教授いただき、必要な知識を身につけるための様々な資料も紹介して頂きました。更に研究を進めていくための道具立てもして頂きました。この場を借りて深く御礼申し上げます。岡崎 智君は、数値計算の面で幾度となくご助力いただきました。また、実りある議論を交わすことができ、私の研究に資するところ大でした。この場を借りて深く御礼申し上げます。森崎 翼君は分子軌道法のプログラム作成の面で私と協力し、Car-Parrinello 法の実装に成功しました。更に、建設的な議論を交わすことが出来ました。ありがとうございました。小泉 裕康准教授には5年間、大変お世話になりました。私の研究に幾度となく助言を頂き、更に、研究の方向性を決めるため貴重なお時間を私との議論に割いて頂き、ありがとうございました。また、公私ともに様々な面で後押ししてくださいました。進路のことで悩んでいる際にも親身になって様々なアドバイスを頂き、私などのためにポスドクの職まで用立てて頂き、本当にありがとうございました。理論物理の知識がほぼゼロの状態からここまで研究を続け、さらに研究者としても成長できたのは先生がいらっしゃったからです。先生は私の最高の師です。重ね重ね本当にありがとうございました。筑波大学計算機科学研究センターの矢花一浩教授、日野 健一教授、産業技術総合研究所上級主任研究員の柳澤 孝博士は私の研究に対して厳しくも実りある助言をしてくださいました。この場を借りて御礼申し上げます。